



Simulation numérique par éléments finis en 3D du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique d'aciers : application à la trempe de pièces forgées ou coulées

Charles Aliaga

► To cite this version:

Charles Aliaga. Simulation numérique par éléments finis en 3D du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique d'aciers : application à la trempe de pièces forgées ou coulées. Mécanique [physics.med-ph]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2000. Français. NNT : 2000ENMP0882 . tel-00273770

HAL Id: tel-00273770

<https://pastel.archives-ouvertes.fr/tel-00273770>

Submitted on 16 Apr 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE
présentée à
L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DES MINES DE PARIS

par
Charles Aliaga
Ingénieur I.S.I.M.

pour l'obtention du titre de

DOCTEUR

en

SCIENCES ET GÉNIE DES MATÉRIAUX

**Simulation numérique par éléments finis en 3D du
comportement thermomécanique au cours du traitement
thermique d'aciers: application à la trempe de pièces forgées
ou coulées**

Soutenue le 28 Avril 2000 devant le jury composé de :

Madame Anne-Marie HABRAKEN	Rapporteur
Monsieur Sören SJÖSTRÖM	Rapporteur
Monsieur Michel BELLET	Examineur
Madame Sabine DENIS	Président
Madame Joëlle DEMURGER	Examineur
Madame Elisabeth MASSONI	Directeur de thèse
Madame Isabelle POITRAULT	Examineur

Remerciements,

Je remercie l'Ecole de Mines de Paris pour m'avoir accueilli durant mes études doctorales au Centre de Mise en Forme des Matériaux à Sophia-Antipolis.

Je désire exprimer toute ma reconnaissance à ma directrice de thèse Elisabeth MASSONI qui m'a guidé, et surtout fait confiance tout au long de la réalisation de ce travail.

Je remercie Madame Anne-Marie HABRAKEN et Monsieur Sören SJOSTROM pour avoir assuré la charge de rapporteurs. Je remercie aussi Mesdames Sabine DENIS, Joëlle DEMURGER (CREAS) pour avoir accepté de faire partie du jury.

Merci à Madame Isabelle POITRAULT (CLI), partenaire industriel de la thèse, pour son engagement dans la réalisation du projet Traitements Thermiques.

Merci à l'ensemble des industriels Aubert&Duval, CETIM, CLI, CREAS, IRSID et PSA pour leur soutien financier, et plus particulièrement Messieurs COURTEAUX (PSA) et TREUIL (IRSID) pour les cas industriels.

Merci à Michel BELLET pour ses encouragements, son aide et son soutien.

Merci à tous les collègues, particulièrement à Olivier Jaouen et Etienne Perchat avec qui je partage une partie de ce travail.

Enfin, merci à tout le personnel du laboratoire pour leur patience et leur disponibilité.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Le rôle de la modélisation dans la compréhension des procédés	2
1.1.1	D'un point de vue général	2
1.1.2	Pour la simulation des traitements thermiques	2
1.2	Les contraintes résiduelles	4
1.2.1	Définition des contraintes résiduelles	4
1.2.2	L'origine des contraintes résiduelles induites par traitement thermique . . .	5
1.2.2.1	Genèse et prévision des contraintes résiduelles	5
1.2.2.2	Conséquences des contraintes résiduelles sur les propriétés mécaniques . . .	7
1.2.3	Développement de codes de calculs	8
1.3	Contexte du Projet	11
1.3.1	Travaux antérieurs effectués autour du logiciel Forge dans le cadre des traitements thermiques	11
1.3.2	Axes de recherche de l'étude	11
	Bibliographie	14
2	Formulation et résolution du problème mécanique	17
2.1	Introduction	18
2.2	La modélisation du problème mécanique	18
2.2.1	Équations d'équilibre	18
2.2.2	Choix d'une loi de comportement	19
2.2.2.1	Le modèle thermo-élasto-viscoplastique: THEVP	19
2.2.2.2	Loi de comportement: résolution locale	26
2.2.2.3	Expression de la loi de comportement globale: module tangent . . .	27
2.2.3	Résolution locale incrémentale	27
2.2.3.1	Méthode numérique d'intégration du problème THEVP:	27
2.2.3.2	Cas d'un cycle uniaxial: modèle monodimensionnel	32
2.2.4	Formulation faible continue du problème mécanique	37
2.2.5	Discretisation spatiale par la méthode des éléments finis	38
2.2.5.1	Choix du type d'élément fini mécanique	39
2.2.5.2	Application au problème thermo-élasto-viscoplastique THEVP . . .	42
2.2.5.3	Propriétés du champ <i>bulle</i>	43
2.2.5.4	Application du MINI-élément au problème THEVP	44
2.3	Convergence élément finis: test numérique	49
2.4	Conclusion	55
	Bibliographie	56
3	La modélisation du problème thermique instationnaire	59
3.1	Équation de la chaleur	60
3.2	Les équations de comportement	60
3.3	Méthode Galerkin à un champ	61
3.3.1	Discretisation spatiale par la méthode des éléments finis	62
3.3.1.1	Différentiation temporelle	62
3.3.1.2	Linéarisation du problème nonlinéaire	64

3.3.2	Méthodes stabilisées pour la résolution du problème de traitement thermique	64
3.3.2.1	Utilisation de la thermique <i>asynchrone</i>	65
3.3.2.2	La thermique <i>asynchrone</i> envisageable pour un calcul 3D	67
3.3.2.3	Utilisation du solveur des équations paraboliques	70
3.4	Contrôle automatique du pas de temps par minimisation d'erreur:	71
3.4.1	Algorithme de contrôle automatique du pas de temps	72
3.4.2	Application du contrôle automatique du pas de temps sur un calcul de trempe	73
3.5	Méthode mixte température & flux en thermique	77
3.5.1	Formulation variationnelle	77
3.5.2	Discretisation	77
3.6	Conclusion	90
	Bibliographie	91
4	Analyse du couplage thermo-mécanique	93
4.1	Couplage thermo-mécanique	94
4.2	Trempe d'un cylindre en Aluminium	96
4.2.1	Résultats: températures, contraintes dans le cylindre	96
4.2.2	Comparaison élément P1/P1 non compatible et MINI-élément	98
4.3	Conclusion	98
	Bibliographie	98
5	Calcul des transformations de phases	103
5.1	Introduction	104
5.2	Modélisation des cinétiques de transformations de phases dans les aciers	104
5.2.1	Généralités sur les courbes Température-Temps-Transformation	104
5.2.2	Les modèles de cinétique des transformations de phases	105
5.2.3	Théories cinétiques <i>anisothermes</i> : extension du formalisme d'Avrami	107
5.2.4	Autres théories de cinétique	110
5.2.5	Transformations sans diffusion:	114
5.2.6	Quel modèle de transformation doit-on choisir?	114
5.3	Description du modèle de transformation de phase choisi	115
5.3.1	Exemple d'application du modèle de transformation de phase	117
5.4	Prise en compte des hétérogénéités en carbone	119
5.4.1	Modèle de modifications des diagrammes TTT avec la teneur en carbone	119
5.4.1.1	Variations des températures caractéristiques avec la teneur en carbone	119
5.4.1.2	Variations des cinétiques isothermes avec la teneur en carbone	120
5.4.1.3	Variations des taux de phase maximum avec la teneur en carbone	122
5.4.1.4	Variations de la dureté avec la teneur en carbone	122
5.4.2	Exemple d'application de décalage d'un TTT avec la teneur en carbone	123
5.5	Prise en compte des contraintes et des déformations	126
5.6	Conclusion	127
	Bibliographie	128
6	Couplage loi de comportement et transformation de phase	131
6.1	Couplage mécanique-métallurgie	132
6.1.1	Plasticité de transformation:	132
6.1.1.1	Phénoménologie de la plasticité de transformation	132
6.1.2	Sources de déformations liées aux transformations de phase	133
6.1.3	Déformation par changement de phase	133
6.1.3.1	Modèle d'écoulement pour la plasticité de transformation	134
6.1.4	Modèle d'homogénéisation	134
6.1.5	Écrouissage de chaque phase	136
6.1.6	Modification de la loi de comportement	137
6.1.6.1	Loi de comportement intégrant le couplage mécanique-métallurgie	137
6.2	Couplage thermique-métallurgie	138
6.2.1	Méthode en capacité et conductivité équivalente	138

6.2.2	Méthode du terme source	139
6.3	Couplage thermo-métallo-mécanique	140
6.3.1	Algorithme de couplage thermo-métallurgique	140
6.3.2	Algorithme de couplage thermo-métallo-mécanique	142
6.4	Conclusion	142
	Bibliographie	143
7	Exemples de simulations numériques	145
7.1	Trempe martensitique: 60NCD11	146
7.1.1	Couplage thermique-métallurgie	146
7.1.2	Couplage thermique-métallurgie-mécanique	146
7.1.3	Influence de la nature de l'écrouissage	151
7.1.4	Couplage contrainte-transformation de phases	151
7.1.5	Paramètres numériques	152
7.2	Traitement perlitique: XC80	154
7.2.1	Couplage thermique-métallurgie	154
7.2.2	Couplage thermique-métallurgie-mécanique	155
7.2.3	Couplage contrainte-transformation de phases	156
7.2.4	Conclusion sur les premiers calculs	156
7.3	Calculs sur cylindre massif: comparaison matériau homogène et hétérogène	160
7.4	Exemples industriels de simulations numériques	167
7.4.1	Calcul sur coupon de rail	167
7.4.2	Calcul sur un pignon automobile	171
7.4.3	Calcul sur une pièce massive de grande dimension	177
7.5	Conclusion	180
	Bibliographie	180
8	Conclusion	181
	Bibliographie	184

Table des principales notations

σ ,	tenseur des contraintes de Cauchy.
v ,	champ de vitesse.
s ,	déviateur du tenseur des contraintes de Cauchy.
$p = -\frac{1}{3}tr(\sigma)$,	pression hydrostatique.
x ,	tenseur des contraintes cinématiques (back stress).
$\sigma_{eq} = J_2$,	contrainte équivalente de Von-Mises.
T ,	température.
\dot{T} ,	vitesse de refroidissement.
$\sigma_0(T)$,	contrainte d'écoulement du matériau.
$\sigma_{00}(T)$,	seuil statique du matériau.
$0 < \beta < 1$,	ratio entre écrouissage isotrope et cinématique.
$R(\bar{\epsilon}, T)$,	fonction d'écrouissage.
$R'(\bar{\epsilon}, T)$,	module d'écrouissage non-linéaire.
$H(T)$,	module d'écrouissage.
$n(T)$,	coefficient d'écrouissage.
$\sigma^p(T) = (1 - \beta)R(\bar{\epsilon}, T)$,	contrainte plastique du matériau.
g ,	fonction de charge de Von-Mises.
ϵ^t ,	tenseur vitesse de déformation totale.
ϵ^{el} ,	tenseur vitesse de déformation élastique.
ϵ^{th} ,	tenseur vitesse de déformation thermique.
ϵ^{vp} ,	tenseur vitesse de déformation visco-plastique.
ϵ^{tr} ,	tenseur vitesse de déformation de changement de phase.
ϵ^{pt} ,	tenseur vitesse de déformation de plasticité de transformation.
Ω ,	potentiel viscoplastique.
$\dot{\bar{\epsilon}}$,	vitesse de déformation plastique équivalente.
$\bar{\epsilon}$,	déformation plastique équivalente.
$K(T)$,	fonction de consistance visqueuse.
$m(T)$,	coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation.
$\dot{\lambda}$,	multiplicateur plastique.
α ,	coefficient de dilatation.
D ,	matrice d'élasticité.
E ,	module d'Young.
ν ,	coefficient de Poisson.
μ ,	coefficient de Lamé.
χ ,	coefficient de compressibilité.
v_h ,	champ de vitesse discret.
v_l ,	partie linéaire du champ de vitesse discret.
b ,	partie bulle du champ de vitesse discret.
p_h ,	champ de pression discret.
s^l ,	partie linéaire du déviateur des contraintes.
s^b ,	partie bulle du déviateur des contraintes.

ρ ,	masse volumique du matériau.
k ,	conductivité du matériau.
c ,	chaleur massique du matériau.
\dot{W} ,	terme de couplage thermique, source de chaleur.
q ,	vecteur flux de chaleur.
ϕ_{imp} ,	flux de chaleur imposé.
T_{ext} ,	température extérieure.
h ,	coefficient de transfert thermique.
y_k ,	proportion en volume de la phase k .
$y_{max,k}$,	proportion maximale en volume de la phase k .
τ ,	temps d'incubation de Scheil.
n ,	premier coefficient d'Avrami.
b ,	deuxième coefficient d'Avrami.
D_f ,	décalage en temps du diagramme TTT de la ferrite.
D_p ,	décalage en temps du diagramme TTT de la perlite.
D_b ,	décalage en temps du diagramme TTT de la bainite.
D_σ ,	décalage en temps du diagramme TTT par la contrainte.

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	Le rôle de la modélisation dans la compréhension des procédés	2
1.1.1	D'un point de vue général	2
1.1.2	Pour la simulation des traitements thermiques	2
1.2	Les contraintes résiduelles	4
1.2.1	Définition des contraintes résiduelles	4
1.2.2	L'origine des contraintes résiduelles induites par traitement thermique	5
1.2.3	Développement de codes de calculs	8
1.3	Contexte du Projet	11
1.3.1	Travaux antérieurs effectués autour du logiciel Forge dans le cadre des traitements thermiques	11
1.3.2	Axes de recherche de l'étude	11
	Bibliographie	14

1.1 Le rôle de la modélisation dans la compréhension des procédés

1.1.1 D'un point de vue général

Avant de *dérouler* tout le formalisme mathématique nécessaire à la modélisation¹ du procédé de traitement thermique des aciers, il me semble important de réfléchir, sur le rôle de la simulation dans les métiers de la métallurgie, en particulier en ce qui concerne la relation qui existe entre modélisation et optimisation des procédés. Modéliser et simuler sont des verbes aux sens voisins qui sont utilisés pour se référer aux différentes étapes de la démarche générale de modélisation: modéliser, c'est construire un système représentant les structures essentielles d'une réalité; simuler, c'est reproduire artificiellement la nature dans le domaine technique. La modélisation est donc une tentative de représentation synthétique et simplifiée de la réalité physique, avec pour but de progresser dans la connaissance [Birat97].

Sur le plan historique, la modélisation a profondément évolué grâce aux progrès du calcul numérique (sur ordinateur), qui lui a permis de quitter l'univers des mathématiques pures, laissant aux ingénieurs la possibilité de résoudre de nouveaux problèmes jusqu'alors trop complexes. Les nouvelles méthodes numériques ont alors permis de s'attaquer au temps (régime transitoire, instationnarité), à l'espace (représentation tridimensionnelle) et à la complexité physique (couplages physiques). Comme nous allons essayer de le démontrer dans ce document, la modélisation est devenue aujourd'hui une démarche universelle où la mathématisation et la simulation numérique permettent de mieux comprendre la physique qui nous entoure. Cependant, l'expérimentation reste essentielle pour valider les modèles et les alimenter en données. La simulation doit être un outil de compréhension, et il reste encore beaucoup à faire pour résoudre la complexité des situations réelles.

1.1.2 Pour la simulation des traitements thermiques

La fabrication de pièces en acier, que se soit pour des pièces forgées ou pour des pièces moulées, comporte généralement les opérations de mise en forme proprement dites (par coulée ou par déformation), et celles de traitements thermiques (chauffe, trempe, revenu) (voir *figures 1.1, 1.2*).

Intervenant comme dernier maillon de la chaîne de fabrication, le traitement thermique devra conférer au matériau ses propriétés finales (microstructure et mécanique), sans altérer les objectifs des opérations précédentes (distorsions, contraintes résiduelles,...). Bien que tout phénomène inexpliqué (de rupture, de tapure, ou de déformation) ne soit plus attribué systématiquement aux contraintes résiduelles, les problèmes liés à ces traitements thermiques restent encore souvent abordés à l'aide de méthodes empiriques fondées sur l'expérience et l'intuition. Le développement des outils de simulation numérique doit permettre d'envisager une approche plus pragmatique et rationnelle, cependant nous sommes encore loin de l'appropriation du problème par les ingénieurs de bureaux d'études et des méthodes. Les contraintes résiduelles ne sont que très rarement prises en compte au niveau du dimensionnement ou dans les cahiers des charges. Cette situation est bien sûr due à la complexité des phénomènes liés aux contraintes résiduelles, et nous soulignerons dès à

1. Le mot français *modèle* vient de l'italien *modello* "figure destinée à être reproduite" (avant 1550), issu lui-même du latin tardif *modellus*, altération du latin *modulus*, qui a donné d'une part module et moule.

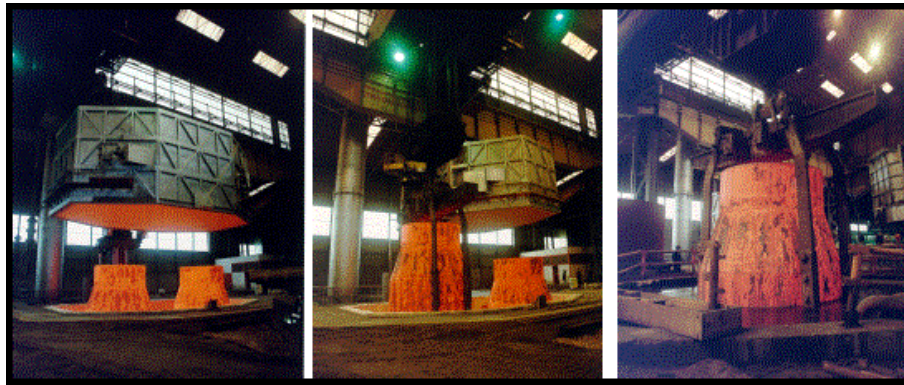


FIG. 1.1 – Exemple de pièce a) sortie du four, b) transport vers le bac de trempe, c) trempe à l'eau, (pièces Creusot-Loire-Industrie)

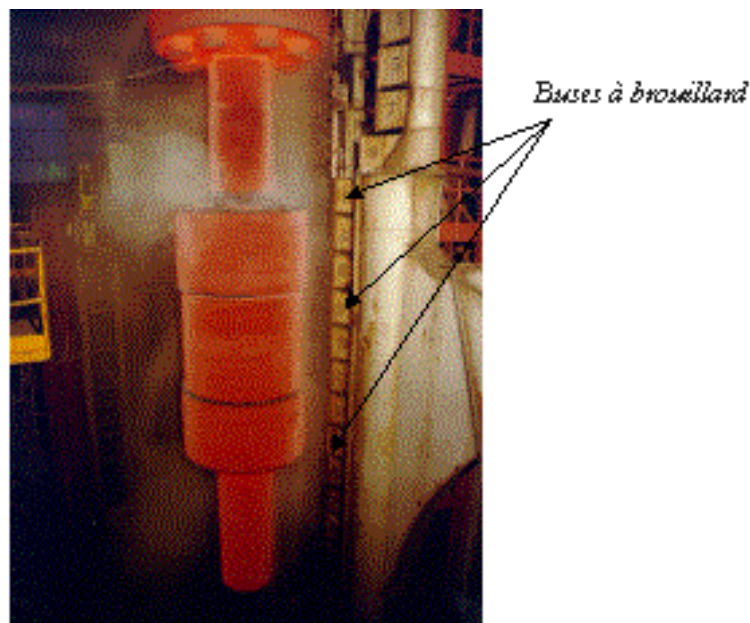


FIG. 1.2 – Autre pièce, trempe au brouillard, (pièces Creusot-Loire-Industrie)

présent trois freins à leurs connaissances [Maeder97]:

- il est nécessaire de mener à bien un très grand nombre d'expériences pour mettre au point des cahiers des charges en vue d'une modélisation des contraintes résiduelles;
- il n'existe pas de logiciel simple pour calculer les contraintes résiduelles et les distortions;
- la multiplicité des opérations avant le traitement thermique (forgeage, redressage, usinage,...) dans le cycle de fabrication, rend la modélisation très difficile.

On peut finalement résumer la situation de la façon suivante:

- hier, les contraintes résiduelles étaient inconnues;
- aujourd'hui, elles sont prises en compte uniquement dans le cas où l'on s'intéresse à leurs influences sur le procédé de fabrication;

- demain, les cahiers des charges devront imposer des valeurs quantitatives des contraintes résiduelles, nécessitant leur calcul et la connaissance de leur influence sur le comportement des pièces élaborées.

Pour cela, il reste un travail important à faire pour transférer le savoir déjà existant, de par l'expérience et la simulation, des laboratoires de recherche vers les industriels.

1.2 Les contraintes résiduelles

1.2.1 Définition des contraintes résiduelles

Les contraintes résiduelles sont des contraintes auto-équilibrées qui existent dans un matériau pris à température uniforme et qui n'est soumis à aucune sollicitation mécanique extérieure. Ces contraintes résiduelles apparaissent lorsqu'il existe, dans le matériau, des hétérogénéités de déformation permanentes qui conduisent à des incompatibilités de déformation [Simon97].

Par convention, les contraintes résiduelles sont classifiées suivant l'échelle à laquelle sont traitées les hétérogénéités de déformation. Tout au long de ce document, nous nous sommes intéressé uniquement aux contraintes résiduelles dites du premier ordre (ou macroscopiques). Elles sont homogènes dans de larges zones incluant plusieurs grains, soit de l'ordre du mm^2 . Par conséquent, nous pourrions les traiter à l'aide de la théorie de la mécanique des milieux continus.

Les paramètres importants vont donc être, indépendamment de la forme initiale du produit (*figure 1.3*):

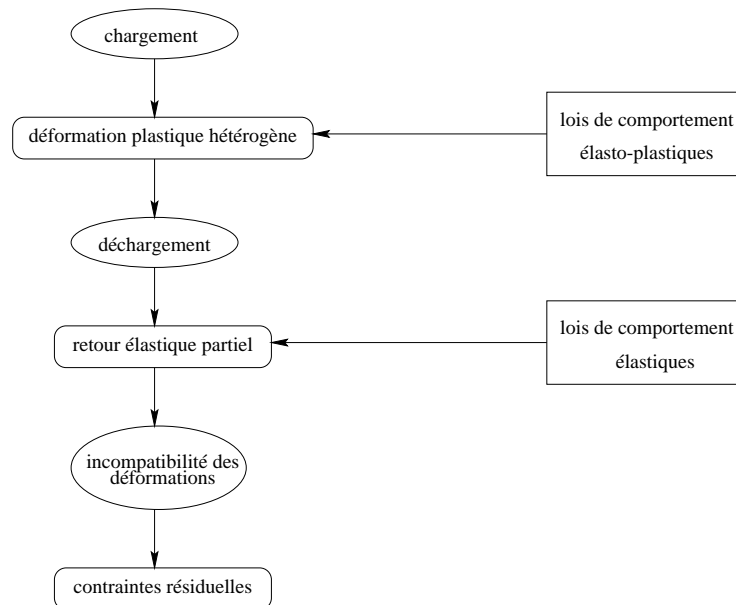


FIG. 1.3 – *Schéma de l'introduction des contraintes résiduelles par déformation plastique [Moussy et al.90].*

- la répartition de la déformation plastique dans le volume du matériau sous l'effet du chargement;
- les lois de comportement du matériau.

La *figure 1.4* présente l'application du schéma de la *figure 1.3* au cas de la déformation par traction uni-axiale d'une éprouvette dont les caractéristiques à coeur et en surface sont différentes. La décharge élastique (trajet-2) conduit à l'incompatibilité des déformations apparaissant dans le volume du matériau et résultant des déformations plastiques initiales hétérogènes. Résultats à l'équilibre, le matériau est soumis à un profil de contraintes résiduelles.

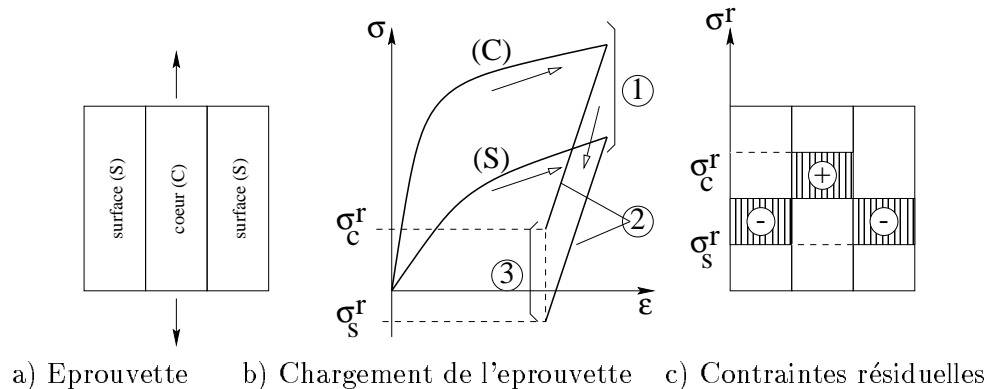


FIG. 1.4 – Application de la *figure 1.3* au cas de la déformation par traction uni-axiale d'une éprouvette dont les caractéristiques à coeur et en surface sont différentes [Moussy et al.90].

Sur cet exemple, c'est un effort exercé par la traction qui a entraîné la plastification du matériau. Lors du traitement thermique la plastification peut être induite par des contraintes internes générées par les gradients thermiques et ce sans effort externe.

1.2.2 L'origine des contraintes résiduelles induites par traitement thermique

Les traitements thermiques, particulièrement les refroidissements rapides comme la trempe, provoquent des contraintes internes dans les pièces traitées. Ces contraintes internes, dites du premier ordre car intervenant à l'échelle macroscopique de la pièce, sont essentiellement dues :

- aux gradients de température entre le coeur et la peau de la pièce provoqués par le refroidissement rapide;
- aux transformations de phases qui s'opèrent suivant la nature du matériau en fonction du chemin thermo-mécanique;
- aux gradients de composition chimique comme dans le cas des traitements thermo-chimiques.

Les contraintes internes vont provoquer des déformations plastiques suivant le schéma des *figures 1.3* et *1.4* et qui conduisent finalement à une pièce distordue et à un état de contraintes résiduelles qui va en modifier le comportement mécanique.

1.2.2.1 Genèse et prévision des contraintes résiduelles

La maîtrise de l'état mécanique (et structural) d'une pièce traitée thermiquement, nécessite la compréhension des processus de formation des contraintes internes au cours du traitement, jusqu'à la formation des contraintes résiduelles. Les méthodes empiriques expérimentales ont fait d'énormes progrès dans la détermination des contraintes résiduelles,

mais elles ne peuvent cependant pas expliquer la genèse des phénomènes intervenant pendant le traitement et responsables de la création des contraintes résiduelles. La modélisation reste alors la seule solution pour expliquer l'évolution des contraintes internes tout au long du traitement.

La *figure 1.5* rappelle les effets de couplage entre les divers domaines physiques responsables de la formation des contraintes internes. Les variations de température dans la pièce conduisent à des contraintes d'origine thermique et à des modifications structurales (i.e. transformations de phases). Ainsi les transformations de phases, par les déformations qui les accompagnent et par les variations de propriétés mécaniques qu'elles engendrent, sont aussi à l'origine des contraintes. Inversement, les évolutions structurales affectent le champ de température (chaleur latente de transformation, propriétés thermophysiques) et les contraintes/déformations modifient les transformations de phases. Les variations de composition (comme les ségrégations) peuvent aussi engendrer des évolutions structurales différentes, et modifier l'ensemble des interactions thermiques, métallurgiques, et mécaniques.

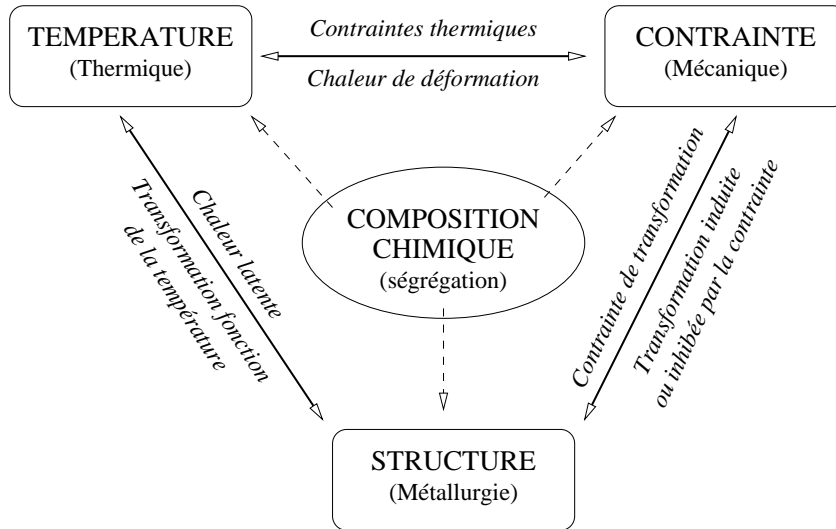


FIG. 1.5 – Schéma des interactions thermiques, métallurgiques et mécaniques en traitement thermique [Inoue et al.92].

Une prévision quantitative de la genèse des contraintes internes n'est possible qu'à partir du moment où l'on sait estimer l'ampleur et la chronologie des déformations plastiques qui se produisent dans tout le volume de la pièce. Ceci implique la connaissance et la modélisation d'une part du comportement thermomécanique et métallurgique du matériau, et d'autre part du procédé, c'est à dire le champ de température, et les conditions aux limites imposées à la pièce traitée. Devant la complexité des phénomènes mis en jeu, et surtout pour aboutir à une prévision opérationnelle de l'évolution des contraintes internes au cours d'un traitement thermique, ce sont des modélisations *macroscopiques* qui ont été développées par la plupart des auteurs. Les modèles à l'échelle mésoscopique (modèle micro-macro) existent et leur développement progresse, mais ils n'ont pas atteint une maturité de compréhension suffisante des phénomènes mis en jeu (surtout dans le cas complexe du traitement thermique) pour des applications industrielles réelles comme nous l'envisageons.

1.2.2.2 Conséquences des contraintes résiduelles sur les propriétés mécaniques

Les contraintes internes interviennent d'une part en altérant la géométrie de la pièce (distorsions), et d'autre part sur le comportement mécanique du matériau, car la sollicitation que subit la pièce en service sera une superposition de la contrainte appliquée et de la contrainte résiduelle:

- Les distorsions ne sont pas une conséquence évidente des contraintes résiduelles, mais elles sont plutôt à rattacher à l'apparition des déformations dues au traitement. Il faut bien distinguer, lorsque on parle de déformation pendant le traitement thermique, déformation locale qui est la résultante locale du schéma complexe présenté sur la *figure 1.5*, d'une déformation globale dite distorsion correspondant à l'équilibre des contraintes de l'ensemble de la pièce. Ceci pose d'ailleurs le problème de la validation, les contraintes résiduelles peuvent être correctement simulées sans toutefois avoir une distorsion de trempe comparable à l'expérience. La distorsion a de nombreuses origines (*figure 1.6*); le matériau va conditionner la réponse contrainte-déformation (i.e. loi de comportement); le procédé lui même en fonction des conditions aux limites imposées modifiera la réponse du matériau; et la géométrie de la pièce en conditionnant la répartition des gradients thermiques-mécaniques-métallurgiques. Une manifestation spectaculaire des distorsions sont les tapures de trempe que l'on peut observer lors du traitement thermique des aciers lorsque, dans certaines conditions, l'état de contrainte local dépasse la résistance instantanée du matériau et amène à la rupture (*figure 1.7*).

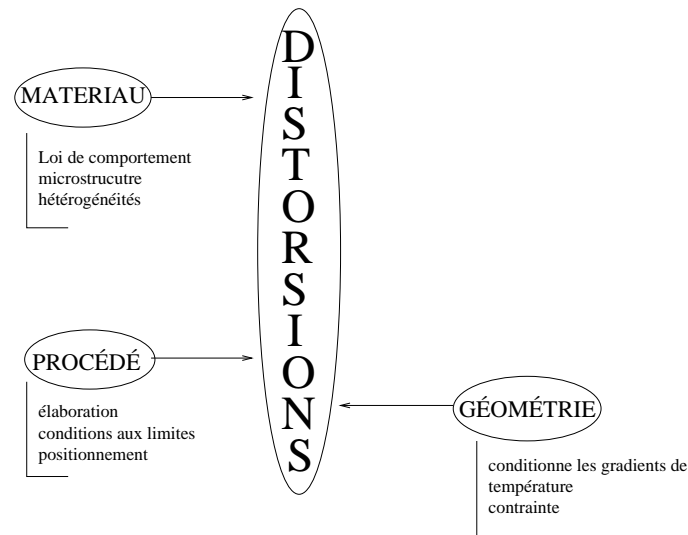


FIG. 1.6 – *Liste non exhaustive de paramètres responsables de distorsions [Lasserre et al.97]*

- Les contraintes résiduelles ont un effet important sur la tenue en sollicitation mécanique cyclique (fatigue) de la pièce traitée. Et à ce titre, si elles sont optimisées, elles peuvent contribuer à l'amélioration du comportement de la pièce. Ainsi, les contraintes résiduelles de compression en surface vont considérablement rallonger la durée de vie de nombreuses pièces mécaniques. Il arrive également que le profil de contraintes résiduelles soit défavorable et provoque la détérioration des propriétés mécaniques de la pièce, conduisant à sa rupture prématurée.

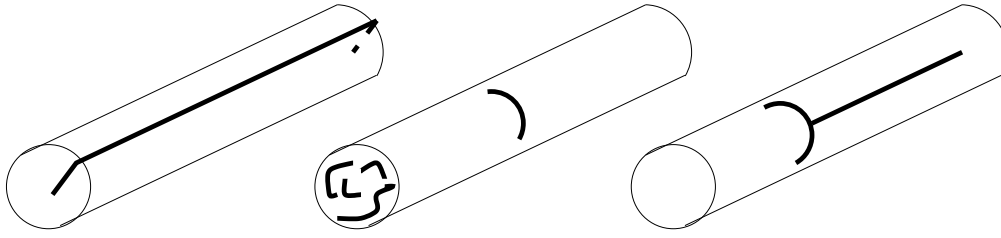


FIG. 1.7 – Aspects des tapures de trempe pour une pièce cylindrique a) tapure longitudinale, b) tapure concentrique, c) tapure mixte, [Bodson et al.75]

1.2.3 Développement de codes de calculs

La prévision des contraintes résiduelles par la modélisation numérique est de nos jours bien développée et ce pour la plupart des procédés de traitement conduisant à des contraintes résiduelles (contraintes résiduelles de forgeage, soudage, traitement thermique,...). Une estimation récente sur l'état d'avancement dans la simulation des contraintes résiduelles induites par traitement thermique peut être trouvée dans [Denis97]. Les codes de calcul modernes intègrent les lois de comportement thermo-élasto-viscoplastique qui vont permettre de résoudre l'équilibre du système et cela en prenant en compte les aspects de couplage présentés sur la *figure* 1.5. Parmi les codes de calcul, on distingue deux groupes;

- les codes dits *maison* développés au sein de laboratoires de recherche. Ces codes sont souvent limités à une simulation monodimensionnelle mais présentent une grande richesse en termes de lois de comportement et de niveaux de couplages entre les divers domaines physiques modélisés (cf *figure* 1.5).
- Les codes commerciaux résumés sur le *tableau* ci-dessous², dont le plus connu est Sysweld© (exemple de simulation sur la *figure* 1.8), et des nouveaux codes venant de la simulation de la mise en forme comme Deform© (exemple de simulation sur la *figure* 1.9). Les codes commerciaux permettent de traiter des calculs sur pièces tridimensionnelles réelles mais aussi d'imposer des conditions aux limites proches de celles rencontrées sur le procédé industriel. Ces codes diffèrent essentiellement par la modélisation plus ou moins complète des couplages (on parlera alors de couplage fort, alterné ou faible) et par le formalisme utilisé pour décrire la loi de comportement.

En parallèle aux codes dits *commerciaux* se sont développés des codes *métier*, destinés à une application spécifique; on citera par exemple LAGAMINE [Habraken89] et RefProf [Colonna92] (pour le traitement thermique des produits longs, avec une simulation 2D étendue).

Les modélisations et simulations numériques sont actuellement plus ou moins validées expérimentalement, une démonstration récente des capacités de chaque code commercial peut être trouvée dans [Proceedings99]. Les confrontations simulation/expérience sont difficiles à mettre en place vu la complexité des phénomènes mis en jeu. En général, la validation passe par une démarche inverse où un 'aller-retour' entre résultats de simulation et résultats expérimentaux.

2. Informations données à titre indicatif et sous réserve.

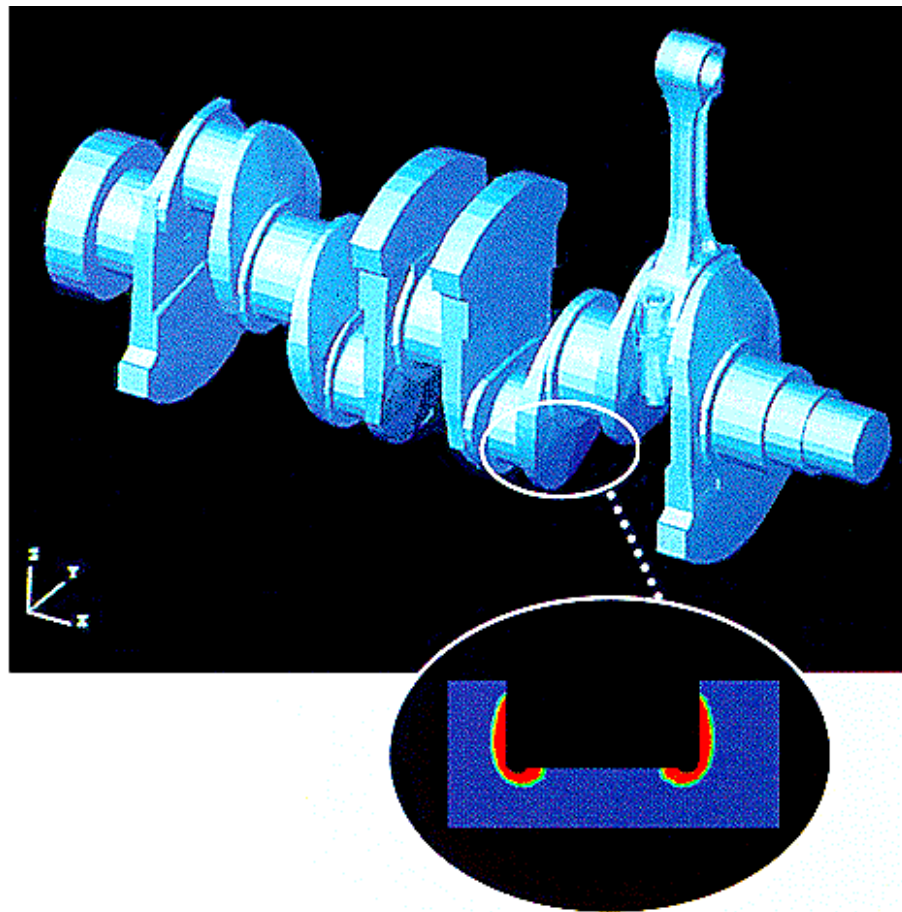


FIG. 1.8 – Exemple de traitement thermique d'un vilebrequin par Sysweld, phase formée (<http://www.esi.fr>.)

NOM CODE	2D/3D	Transf. phases	possibilités de simulation		couplages	applications trempe
			Loi de comportement élastop.	élastoviscopl.		
ABAQUS ³	oui	oui	oui	oui	1,2	oui
ANSYS	oui	-	oui	oui	1	-
DEFORM	oui	oui	oui	oui	1,2	oui
FORGE	oui	oui(ne)	oui(ne)	oui(ne)	1,2(ne),3(ne)	oui(ne)
HEARTS	oui	oui	oui	oui	1,2,3	oui
MARC ⁴	oui	oui	oui	oui	1,2,3	oui
SYSWELD	oui	oui	oui	-	1,2	oui

TAB. 1.1 – Codes de calcul commerciaux pour la simulation du traitement thermique. Couplage: 1. température-contrainte; 2. température-structure; 3. contrainte-structure; ne: notre étude. ^{3,4} ABAQUS et MARC ne disposent pas en standard d'un module de changement de phases avec les couplages, il est introduit par l'intermédiaire de routines utilisateurs respectivement par les auteurs [Mgbokwere et al.99],[Jiansheng et al.99]

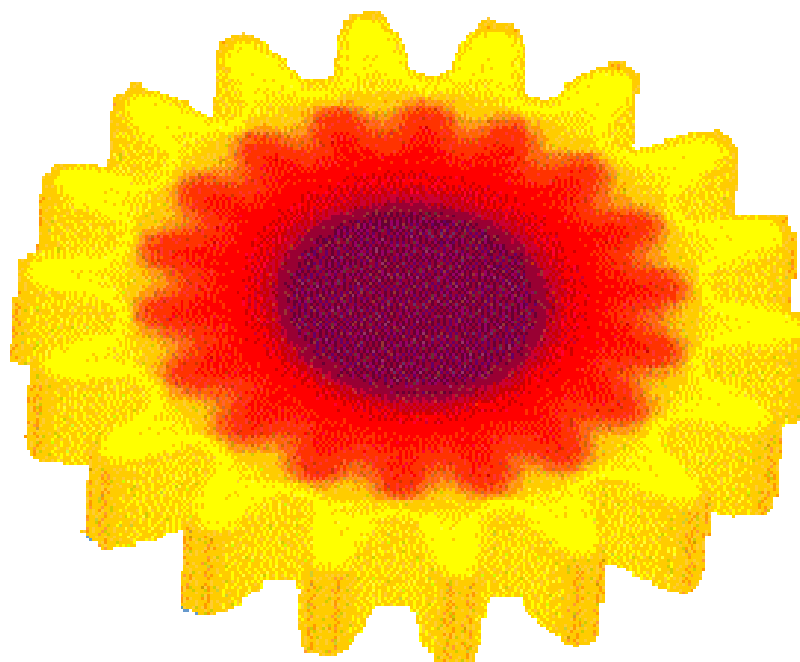


FIG. 1.9 – *Exemple de traitement thermique d'un engrenage par Deform HT, martensite formée (<http://www.deform.com>.)*

1.3 Contexte du Projet

Les objectifs industriels sont de réduire les coûts et délais de fabrication des pièces en matériaux métalliques par une meilleure maîtrise des traitements thermiques qui conduit à une optimisation des propriétés. Ainsi un groupement d'industriels (Aubert&Duval, CETIM, CLI, ASCOMETAL CREAS, IRSID, PSA) a financé cette étude, dont le but est de mettre au point un modèle de simulation permettant la prévision des contraintes et des déformations au cours des traitements thermiques.

1.3.1 Travaux antérieurs effectués autour du logiciel Forge dans le cadre des traitements thermiques

En 1989, UNIMETAL et IRSID ont financé des travaux effectués en partenariat par le LSG2M (École des Mines de Nancy) et le CEMEF (École des Mines de Paris), dans l'objectif de modéliser les déformations et les contraintes résiduelles lors du traitement thermique de rail. Les modèles mis au point ont été introduits dans un code éléments finis 2D étendu RefProf [Colonna et al.92]. Faisant suite à ces travaux, CLI en partenariat avec le LSG2M et le CEMEF a commencé à intégrer dans Forge2 le couplage thermique-métallurgie [Borgeaud et al.95]. Ces travaux ont donné lieu à une seconde collaboration [Akhmouch96] qui a permis de débiter l'implémentation du couplage mécanique-thermique-métallurgie dans Forge2. Ces premiers travaux ont prouvé la faisabilité d'une simulation de trempe, et ont donné lieu au présent projet de thèse financé par les industriels cités ci-dessus et en collaboration avec le LSG2M.

1.3.2 Axes de recherche de l'étude

L'objectif de cette étude est de développer un outil de simulation du traitement thermique des aciers. Notre travail de thèse s'est articulé autour du logiciel Forge©(version 2D et 3D) qui a servi de base aux développements.

La prévision des contraintes internes lors du traitement thermique des aciers est un problème situé au carrefour de plusieurs disciplines. En effet, on abordera: la mécanique des milieux continus pour résoudre l'équilibre du système; la résolution de l'équation de la chaleur; et l'ensemble des phénomènes physiques intervenant lors du procédé qui relèvent essentiellement de la métallurgie. L'ensemble du problème est résolu dans un code de simulation par la méthode des éléments finis qui permettra de simuler des pièces tridimensionnelles dans des conditions proches de la réalité.

Cette étude se décompose principalement en quatre phases:

- **La mécanique** (cf chapitre §2)

Calcul des contraintes internes: aspects numériques

- Nos premiers travaux concernent le développement d'une loi de comportement du matériau. Nous avons utilisé un modèle *macroscopique* dans lequel nous avons intégré une loi thermo-élasto-viscoplastique (THEVP) à écrouissage mixte isotrope et/ou cinématique adaptée à la plage de température (1000 °C-20 °C) étudiée. Nous détaillerons les hypothèses conduisant aux équations de comportement, ainsi que la résolution locale de la loi de comportement (intégration dans le temps en un point). La loi intégrée sera incorporée dans la résolution globale E.F.
- A partir des travaux déjà développés au laboratoire et notamment dans le domaine de la viscoplasticité (comportement Norton-Hoff), nous aborderons la

formulation E.F du problème et l'adaptation au cas de la loi de comportement THEVP. Pour cela nous développerons une gestion particulière de l'élément tétraédrique $P1 + /P1$ que l'on appelle le MINI-élément permettant de diminuer les coûts de calcul pour un ordre d'erreur (au sens des éléments finis) équivalent à une gestion plus lourde de l'élément classique $P1 + /P1$.

– **La thermique** (cf chapitre §7.4.3)

Prévision du champ de température: aspects numériques

- La simulation de la *trempe* (surtout pour des géométries tridimensionnelles) met en jeu des difficultés numériques liées à la nature des forts gradients thermiques impliqués. Dans un premier temps, nous mettrons en évidence cette problématique en décrivant la cause directe des problèmes numériques rencontrés. A la suite de quoi, nous présenterons des méthodes numériques dont l'objectif est de *stabiliser* le schéma numérique.
- Toujours en relation avec le contrôle des chocs thermiques, nous présenterons une technique d'optimisation du pas de temps de résolution. Cet algorithme basé sur l'estimation d'erreur a posteriori nous permettra de contrôler la variation de température incrémentale et d'assurer ainsi la convergence globale de la résolution du système thermique-métallurgique-mécanique.

– **La métallurgie** (cf chapitre §5)

Prévision des cinétiques de transformation de phases au cours du refroidissement:

- Le modèle de transformation de phases en condition anisotherme et sous l'effet de phénomènes interactifs, en prenant en compte:
 - les interactions entre contrainte et transformation de phases;
 - les interactions entre matériaux hétérogènes (ségrégation) et transformation de phases.

Cela consiste à fournir au module de transformation de phases l'ensemble des variables d'état (composition, contrainte, déformation), et à récupérer le taux de transformation des diverses phases constitutives du matériau.

Loi de comportement thermomécanique en cours de transformation de phases

- Cette partie est consacrée à l'intégration des aspects métallurgiques (matériau multiphasé) dans les équations de la loi de comportement et dans les équations de la thermique. La loi de comportement dans le domaine multiphasé et sous la contrainte de changement de phases sera décrite. La plasticité de transformation sera introduite dans la loi de comportement. D'autre part, l'équation de la chaleur sera modifiée et les effets de changement de phases comme la recalcence seront pris en compte.

– **Exemples de calculs** (cf chapitre §7)

Simulation numérique: exemples académiques

- Dans un premier temps, nous présenterons des analyses avec l'ensemble des couplages dans le cas de refroidissement d'éprouvettes cylindriques. Ces calculs pour certains déjà validés seront confrontés aux données expérimentales ou aux résultats obtenus avec le logiciel Quest⁵.

5. Quest est un logiciel du LSG2M (l'Ecole des Mines de Nancy), calculs effectués par [Louin].

Simulation numérique: exemples réels

- Ensuite nous présenterons des calculs tridimensionnels industriels avec certaines confrontations expérimentales. Le but de cette partie est de montrer que le modèle est capable de prévoir les tendances avec un jeu de données approximatives.

Bibliographie

- [Akhmouch96] Akhmouch (M.). – Simulation numérique d'une trempe. *Rapport de stage Cemef, Ecole des Mines de Paris*, Juillet 1996.
- [Birat97] Birat (J.P.). – Modélisation et conduite des processus sidérurgiques. *La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des matériaux*, novembre 1997, pp. 1347–1367.
- [Bodson et al.75] Bodson, Flahaut, Fremot et Bonte. – Détection des tapures de trempe par émission acoustique. *Revue pratique du controle industriel*, n° 73, Juin 1975, p. 33.
- [Borgeaud et al.95] Borgeaud (O.) et Gabriel (J.M.). – Etude et analyse thermomécanique d'éléments finis intégrant les transformations de phases des aciers. *Rapport de stage Ecole des Mines d'Alès*, Juin 1995.
- [Colonna et al.92] Colonna (F.), Massoni (E.), Denis (S.), Chenot (J-L.), Wendenbaum (J.) et Gauthier (E.). – On thermo-elastic-viscoplastic analysis of cooling processes including phases changes. *Journal of Materials Processing Technology*, n° 34, 1992, pp. 525–532.
- [Colonna92] Colonna (F.). – *Modélisation numérique du refroidissement des rails*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1992.
- [Denis97] Denis (S.). – Préviation des contraintes résiduelles induites par traitement thermique et thermochimique. *La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des matériaux*, février 1997, pp. 157–176.
- [Habraken89] Habraken (A-M.). – *Contribution à la modélisation du formage des métaux par la méthode des éléments finis*. – Thèse de doctorat, Université de Liège, 1989.
- [Inoue et al.92] Inoue (T.), Ju (D.Y) et Arimoto (K). – Metallo-thermo-mechanical simulation of quenching process. theory and implementation of computer code 'hearth's'. *Proceeding of the first international conference on quenching and control of distortion, Chicago, Illinois, USA*, septembre 1992.
- [Jiansheng et al.99] Jiansheng (P.), Jianfeng (G.), Dong (T.) et Ruan (D.). – Computer aided design of complicated quenching process by means of numerical simulation method. *Proceeding of the 3rd international conference on quenching and control of distortion, Prague, Czech Republic.*, March 1999, pp. 251–259.
- [Lasserre et al.97] Lasserre (R.) et Henault (E.). – Une méthodologie d'étude des déformations lors du traitement thermique: l'éprouvette de déformation. *Journées franco-allemandes ATTT-AWT Belfort*, Avril 1997, pp. 26–30.
- [Louin] Louin (J.C). – *Préviation par calcul des microstructures, des contraintes et des déformations au cours du traitement thermique de pièces de grande dimensions*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Nancy. Thèse en cours.
- [Maeder97] Maeder (G.). – La prise en compte des contraintes résiduelles dans l'industrie automobile. *La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des Matériaux*, février 1997, pp. 199–206.
- [Mgbokwere et al.99] Mgbokwere (C.), W.Dowling, Smith (D.), Copple (W.) et Mack (C.). – Modeling the heat treatment behavior of a transmission ring gear

- blank. *Proceeding of the 3rd international conference on quenching and control of distortion, Prague, Czech Republic.*, March 1999, pp. 355–363.
- [Moussy et al.90] Moussy (F.) et Franciosi (P.). – *Physique et mécanique de la mise en forme des métaux.* – Presse du CNRS/IRSID, 1990, *Ecole d’été d’Oléron.*
- [Proceedings99] Proceedings. – *The 3rd International Conference On Quenching And Control Of Distortion.* – ASM International, March 1999 volume Prague, Czech Republic.
- [Simon97] Simon (A). – Introduction au thème ”contraintes résiduelles”. *La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des matériaux*, février 1997, pp. 151–156.

Chapitre 2

Formulation et résolution du problème mécanique

Sommaire

2.1	Introduction	18
2.2	La modélisation du problème mécanique	18
2.2.1	Équations d'équilibre	18
2.2.2	Choix d'une loi de comportement	19
2.2.3	Résolution locale incrémentale	27
2.2.4	Formulation faible continue du problème mécanique	37
2.2.5	Discretisation spatiale par la méthode des éléments finis	38
2.3	Convergence élément finis: test numérique	49
2.4	Conclusion	55
	Bibliographie	56

2.1 Introduction

Le logiciel Forge3© est un logiciel basé sur la méthode des éléments finis (E.F) modélisant les procédés de mise en forme (forgeage, laminage,...) de pièces complexes. Une présentation générale de ce code de calcul peut être trouvée dans [Boyre99]. La simulation du traitement thermique met en jeu différents aspects numériques qui sont en marge des thématiques classiques de la simulation de la mise en forme comme le contact, le frottement, ou les remaillages. Dans le cas des traitements thermiques, la déformation totale est faible (de l'ordre de 1%) et se trouve le plus souvent dans le domaine des déformations élastiques. Pourtant, paradoxalement, les déformations plastiques induites, aussi petites qu'elles soient, seront la principale cause des contraintes résiduelles et des distorsions de trempe. La simulation du traitement thermique requiert alors une description précise et affinée de la loi de comportement afin de prévoir la déformation du matériau, ainsi qu'un traitement numérique spécifique (intégration, type de formulation E.F) des équations d'équilibre.

La première partie de ce chapitre est consacrée à la description de la loi de comportement, avec dans un premier temps sa formulation (équations de comportement), et dans un second temps sa résolution numérique (intégration temporelle) dans un contexte de simulation E.F.

La seconde partie de ce chapitre est consacrée à la résolution numérique de l'équilibre mécanique d'un corps soumis à des conditions aux limites données. Nous présentons une méthode de résolution E.F basée sur l'élément tétraédrique MINI-élément. L'utilisation de cet élément constitue une méthode originale de l'adaptation de l'élément plus courant $P1+/P1$ qui a fait déjà l'objet de précédents travaux au laboratoire [Gay95], [Menai95]. Nous montrerons que la formulation MINI-élément développée par [Coupez97] dans le cadre de la visco-plasticité peut être adaptée et utilisée pour une loi thermo-élasto-viscoplastique (THEVP) sous certaines hypothèses que nous détaillerons.

2.2 La modélisation du problème mécanique

On supposera dans la résolution du problème mécanique que la température est connue en chaque point et en tout instant. L'intégration de la loi de comportement sur chaque pas de temps de calcul mécanique se fera à température constante, la température pouvant évoluer en chaque point d'un incrément de calcul mécanique à l'autre..

2.2.1 Équations d'équilibre

Pour plus d'informations sur les équations fondamentales de la dynamique des milieux continus le lecteur pourra se référer à [Lematre et al.88].

On supposera les forces de masse d'inertie sont négligées devant les forces internes (contraintes internes). Soit Ω un domaine borné de \mathbb{R}^3 de frontière $\partial\Omega$ régulière.

l'équilibre du domaine Ω s'écrit:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \sigma + \rho f &= 0, \text{ équilibre mécanique,} \\ \operatorname{div} \vec{v} &= 0, \text{ conservation de la masse,} \end{aligned} \tag{2.1}$$

où σ représente le tenseur des contraintes de Cauchy, f la densité des forces volumiques, dans notre cas la gravité, et ρ la masse volumique du matériau. Pour fermer le problème

2.1 il convient d'ajouter:

- la loi de comportement qui traduit la physique du milieu, et qui relie σ au champ de vitesse de déformation totale $\dot{\epsilon}^t(v)$. $\dot{\epsilon}$ est l'opérateur gradient symétrique du champ de vitesses v : $\frac{1}{2}(\nabla^t + \nabla \cdot)$;
- les conditions aux limites, qui sont données en contraintes, ou en vitesses imposées.

Nota: convention

De manière générale, pour un tenseur τ , on prendra la convention de noter t sa partie déviatorique et $tr(\tau)$ sa partie sphérique tel que ces trois tenseurs vérifient la relation suivante:

$$t = \tau - \frac{1}{3}tr(\tau)1 \quad (2.2)$$

De la même manière, on définira $\dot{\tau}$ et \dot{t} , les dérivées temporelle des tenseurs τ et t .

Dans l'écriture tridimensionnelle des lois de comportement, l'hypothèse d'isotropie conduit à utiliser les invariants des tenseurs de contraintes σ et de vitesses de déformation $\dot{\epsilon}^t$ et leurs déviateurs définis par:

$$\begin{aligned} s &= \sigma - \frac{1}{3}tr(\sigma)1 = \sigma + p1 \\ \dot{\epsilon}^t &= \dot{\epsilon}^t - \frac{1}{3}tr(\dot{\epsilon}^t)1 \end{aligned} \quad (2.3)$$

L'étude de la relation de σ en fonction de $\dot{\epsilon}^t(v)$ fait l'objet des paragraphes suivants.

2.2.2 Choix d'une loi de comportement

Une des difficultés de la modélisation du traitement thermique repose sur le choix d'une loi de comportement adaptée à l'évolution rhéologique du matériau. La gamme des températures couvertes lors du procédé est telle que le comportement du matériau en est fortement influencé. La théorie thermo-élasto-plastique ne permet pas de prendre en compte les déformations dépendantes du temps. Or, il est admis que la plupart des métaux présentent un caractère visqueux significatif dès que la température dépasse les $\frac{4}{10}$ de la température de fusion. Cette température est largement atteinte et dépassée dans la plupart des traitements thermiques. Aussi, nous faut-il choisir une loi représentant la rhéologie du matériau depuis son comportement visqueux à chaud jusqu'au comportement élastoplastique à froid, voire avec retour élastique en fin de traitement.

2.2.2.1 Le modèle thermo-élasto-viscoplastique: THEVP

Au cours du traitement thermique, les déformations sont faibles, on peut donc admettre une partition de la vitesse de déformation sous la forme de l'équation de Prandtl-Reuss:

$$\dot{\epsilon}^t = \dot{\epsilon}^{el} + \dot{\epsilon}^{in} + \dot{\epsilon}^{th} \quad (2.4)$$

- el = élastique; th = thermique; in = inélastique

La déformation inélastique correspond à l'ensemble des phénomènes physiques suivants:

- une déformation plastique instantanée, indépendante du temps;

- une déformation viscoplastique;

1. Déformation inélastique: couplage plasticité-viscoplasticité:

Il existe deux approches permettant de rendre compte des déformations viscoplastiques.

- Théorie à deux déformations inélastiques:

Cette première approche constitue une extension de l'hypothèse de partition de la vitesse de déformation totale et introduit une décomposition de la déformation en:

$$\dot{\epsilon}^{in} = \dot{\epsilon}^p + \dot{\epsilon}^{vp} \quad (2.5)$$

où $\dot{\epsilon}^p$ est une déformation plastique instantanée, et $\dot{\epsilon}^{vp}$ la déformation viscoplastique (ou déformation de fluage, *creep strain*). Ce modèle introduit par [Delobelle et al.84] suppose une interaction entre les deux modes de déformation plastique et viscoplastique: l'écrouissage induit par la déformation plastique influence la vitesse de déformation viscoplastique et vice-versa.

Sans entrer dans les détails, les équations générales de la plasticité et de la viscoplasticité couplées se mettent sous la forme:

$$\dot{\epsilon}^{in} = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \sigma} + \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma}, \quad (2.6)$$

où f est la surface limite d'élasticité (surface de charge plastique), $\dot{\lambda}$ le multiplicateur plastique, et Ω le potentiel viscoplastique. L'effet d'une telle combinaison peut être illustré en traction (*figure 2.1*). La courbe supérieure correspond à la déformation plastique instantanée: c'est la courbe de traction pour une vitesse infinie, et correspond à une saturation de la contrainte visqueuse σ_v en fonction de la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$. Pour des vitesses de déformation plus faibles, la contrainte visqueuse diminue jusqu'à atteindre la valeur de la contrainte interne σ_i pour une vitesse de déformation nulle. Il y a ainsi un double effet de saturation en fonction de la vitesse: vers les vitesses nulles, la courbe limite est donnée par la contrainte interne σ_i , vers les vitesses infinies la courbe limite est donnée par la courbe de plasticité instantanée ($\dot{\epsilon} = \infty$).

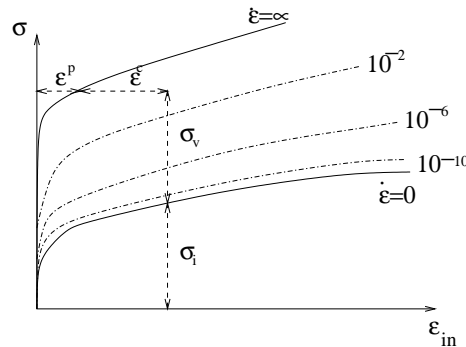


FIG. 2.1 – Schématisation des courbes d'écrouissage à différentes vitesses par superposition d'une théorie de viscoplasticité et d'une théorie de plasticité [Lematre et al.88].

Cette approche (*creep strain*) a été reprise par [Inoue et al.97] dans le code HEARTS (Heat Treatment Simulation), et notamment pour prendre en compte le fluage lors du revenu. On définit deux variables d'écrouissage, la première liée à l'écrouissage par la plasticité $\bar{\epsilon}^p$ terme de déformation plastique équivalente, la seconde liée à l'effet de la déformation viscoplastique $\bar{\epsilon}^c$:

$$\begin{aligned}\dot{\epsilon}^p &= \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \sigma} \quad f = f(\sigma, \bar{\epsilon}^p), \\ \dot{\epsilon}^c &= \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} \quad \Omega = \Omega(\sigma, \bar{\epsilon}^c).\end{aligned}\tag{2.7}$$

Les deux variables d'écrouissage peuvent être couplées par une loi d'évolution.

- Théorie à une déformation inélastique: modèle unifié

Il existe un autre moyen de tenir compte des deux échelles de temps mentionnées ci-dessus. On ne considère pas de déformation plastique instantanée mais on introduit les deux échelles de temps dans la loi d'écrouissage par une combinaison de l'écrouissage par la plasticité et de l'écrouissage par la viscosité. Cette approche, choisie par [Colonna et al.92] pour la simulation du refroidissement de rail, conduit au formalisme suivant:

$$\dot{\epsilon}^{in} = \dot{\epsilon}^{vp} = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma}.\tag{2.8}$$

L'avantage d'un tel modèle est la dégénérescence possible depuis le comportement viscoplastique à haute température, jusqu'au modèle plastique à basse température. Le modèle de comportement à une déformation inélastique unifiée, est celui qui est, d'après la littérature, microscopiquement et macroscopiquement le plus adéquat pour prendre en compte les phénomènes qui dépendent du temps [Chaboche89], [Delobelle et al.84]; c'est cette approche que nous avons suivie et que nous décrivons plus précisément dans la partie suivante.

2. Écoulement viscoplastique:

Dans le cadre général de la thermodynamique, on a postulé l'existence d'un potentiel mécanique de dissipation dont la connaissance fournit les lois d'évolution de la déformation viscoplastique et des variables internes. Dans ce qui suit, nous nous intéressons seulement au potentiel Ω de dissipation mécanique et renvoyons le lecteur aux ouvrages de référence [Lematre et al.88], [Germain83] pour l'analyse thermodynamique. Ce potentiel est choisi de la forme [Colonna et al.92]:

$$\Omega = \frac{K(T)}{M(T) + 1} \left\langle \frac{\sigma_{eq} - (\sigma_{00}(T) + \sigma^p(T))}{K(T)} \right\rangle^{M(T)+1}\tag{2.9}$$

où T est la température, $\sigma_{eq} = J_2 = [\frac{3}{2}(s-x) : (s-x)]^{\frac{1}{2}}$ est la contrainte équivalente, x la variable d'écrouissage cinématique représentant la position du centre du domaine élastique par rapport à l'origine des contraintes déviatoriques s . $M(T) = \frac{1}{m(T)}$ l'inverse du coefficient de sensibilité à la vitesse, K la consistance, et $(\sigma_{00}(T) + \sigma^p(T))$ le rayon du domaine d'élasticité.

La déformation viscoplastique est calculée à partir de l'équation 2.8 selon la règle de normalité:

$$\dot{\epsilon}^{vp} = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} = \frac{3}{2} \frac{1}{\sigma_{eq}} \frac{\langle \sigma_{eq} - (\sigma_{00}(T) + \sigma^p(T)) \rangle^{\frac{1}{m(T)}}}{K(T)^{\frac{1}{m(T)}}} (s - x), \quad 1 \quad (2.10)$$

Deux situations sont possibles suivant la valeur de $\langle \rangle$. On définit ainsi la fonction de charge g de Von-Mises ou équation de consistance plastique:

$$g = \sigma_{eq} - (\sigma_{00}(T) + \sigma^p(T)), \quad (2.11)$$

soit: $\sigma_{eq} \geq (\sigma_{00}(T) + \sigma^p(T))$, alors $g \geq 0$: domaine plastique.

soit: $\sigma_{eq} < (\sigma_{00}(T) + \sigma^p(T))$, alors $g < 0$ pas de déformation plastique, domaine élastique.

Ces deux situations délimitent le domaine élastique sans déformation plastique, du domaine plastique, pour lequel on définit les scalaires $\dot{\bar{\epsilon}}$, et $\bar{\epsilon}$ comme:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\epsilon}} &= \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\epsilon}^{vp} : \dot{\epsilon}^{vp}} = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma_{eq}}, \\ \bar{\epsilon} &= \int_0^t \dot{\bar{\epsilon}} dt, \end{aligned} \quad (2.12)$$

Ainsi, la contrainte équivalente se met sous la forme:

$$\begin{aligned} \sigma_{eq} &= \sigma^{seuil} + \sigma^p + \sigma^{vp} \\ \sigma_{eq} &= \sigma_{00}(T) + (1 - \beta(T)) R(\bar{\epsilon}, T) + K(T) \dot{\bar{\epsilon}}^m(T) \end{aligned} \quad (2.13)$$

$R(\bar{\epsilon}, T)$ est la fonction d'écrouissage, β est un paramètre compris entre 0 et 1 que l'on définira un peu plus loin. La relation 2.10 peut être écrite de la manière suivante:

$$\dot{\epsilon}^{vp} = \frac{3}{2} \frac{1}{\sigma_{eq}} \dot{\bar{\epsilon}} (s - x) = \dot{\lambda}(T) (s - x), \quad (2.14)$$

ce qui permet de définir le multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$:

$$\dot{\lambda} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\bar{\epsilon}}}{\sigma_{eq}}. \quad (2.15)$$

La déformation plastique isotrope peut s'accompagner d'un écrouissage cinématique, qui est le plus souvent négligé en mise en forme, mais important si l'on veut rendre compte des chargements cycliques. Or les chargements imposés à la pièce lors du

1. Les crochets indiquent la partie positive;
 $\langle x \rangle = x$ si $x \geq 0$
 $\langle x \rangle = 0$ si $x \leq 0$.

traitement thermique sont de nature non monotones, avec des passages traction-compression. De plus, notons que [Chaboche89] a montré que dans le domaine des petites déformations, l'écrouissage est plutôt de type cinématique avec une faible expansion isotrope et une distorsion du domaine élastique. Ceci justifie le fait que l'on utilise dans notre loi de comportement un écrouissage cinématique superposé à un écrouissage isotrope. [Sjtrm85], [Hughes84] proposent de prendre pour contrainte interne x (backstress) la relation suivante:

$$x = \beta \frac{2}{3} R'(\bar{\epsilon}, T) \epsilon^{vp} \quad ;^2 \quad (2.16)$$

La fonction d'écrouissage R pouvant s'écrire comme une fonction puissance de la déformation plastique équivalente $\bar{\epsilon}$:

$$R(\bar{\epsilon}, T) = H(T) \bar{\epsilon}^{n(T)}, \quad R'(\bar{\epsilon}, T) = n(T) H(T) \bar{\epsilon}^{n(T)-1}, \quad (2.17)$$

où H est le module d'écrouissage homogène à une contrainte, et $n(T)$ le coefficient d'écrouissage.

Le paramètre β dans les équations 2.13 et 2.16 détermine la proportion d'écrouissage isotrope et cinématique. On remarquera que (*figure 2.2*):

$$\begin{aligned} \beta = 1 &\leftrightarrow \text{écrouissage purement cinématique;} \\ \beta = 0 &\leftrightarrow \text{écrouissage purement isotrope.} \end{aligned} \quad (2.18)$$

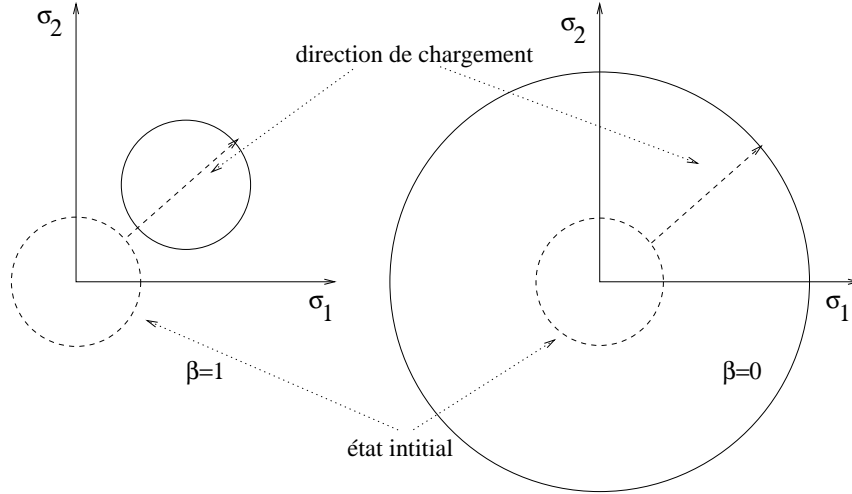


FIG. 2.2 – Représentation bidimensionnelle dans l'espace des contraintes déviatoriques de l'influence de la valeur du paramètre β sur le type d'écrouissage et l'évolution du domaine élastique.

Les valeurs intermédiaires de β mettent en jeu les deux formes d'écrouissage.

La loi d'évolution pour x est obtenue par dérivation temporelle de l'équation 2.16, en prenant en compte la variation des paramètres avec la température T [Cheik87]:

² la superposition de ' indique la dérivation avec la variable en argument:
 $F'(x) = \frac{\partial F}{\partial x}$

$$\dot{x} = \frac{2}{3}\beta R'(\bar{\epsilon})\dot{\epsilon}^{vp} + \underbrace{\dot{T} \frac{1}{R'} \frac{\partial R'}{\partial T} x}_{\text{couplage thermique}} . \quad (2.19)$$

La prise en compte du couplage thermique dans l'équation 2.19 est nécessaire. Lors de la trempe, la vitesse de refroidissement peut être importante et faire varier brusquement les propriétés mécaniques sur un intervalle de temps très réduit. C'est aussi un moyen de prendre en compte la variation des paramètres pendant le changement de phase.

Représentation schématique de la loi de comportement:

Schématiquement (cf *figure 2.3*), on peut imaginer que, dans l'espace des contraintes déviatoriques principales, les surfaces équipotentielles de l'écoulement, ou surfaces d'égale dissipation, constituent une famille de surfaces *emboîtables*. Pour un état d'écrouissage fixé, représenté par exemple par le centre x et la dimension de sa surface intérieure ($\sigma_{00} + \sigma^p$), la contrainte visqueuse σ^{vp} est d'autant plus élevée que la vitesse de déformation est importante .

Pour une loi additive, la dégénérescence de la loi en un comportement élastoplastique se fait lorsque la fonction de viscosité K tend vers 0. Quelle que soit la vitesse de déformation, toutes les équipotentielles sont sur la surface d'écoulement plastique définie par $\sigma_{00} + \sigma^p$.

On peut également définir une contrainte d'écoulement pour laquelle les déformations plastiques et viscoplastiques sont contenues dans le même terme, c'est le cas des lois multiplicatives de type Norton-Hoff:

$$\begin{aligned} \sigma_{eq} &= \sigma^{seuil} + \sigma^p \times \sigma^{vp} \\ \sigma_{eq} &= \sigma_{00}(T) + R(\bar{\epsilon}, T) \times K(T)\dot{\epsilon}^m(T) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Dans ce cas, les transitions du comportement viscoplastique vers un comportement plastique sont alors moins bien gérées.

3. Déformation thermo-élastique:

La vitesse de déformation thermique $\dot{\epsilon}^{th}$ est reliée au coefficient de dilatation α et à la vitesse de refroidissement \dot{T} telle que³:

$$\dot{\epsilon}^{th} = \alpha \dot{T} \mathbf{1} \quad , \quad tr(\dot{\epsilon}^{th}) = 3\alpha \dot{T}. \quad (2.21)$$

La déformation élastique ϵ^{el} est reliée au champ de contrainte par la loi de Hooke qui ne fait intervenir que 2 paramètres, le module d'Young E et le coefficient de Poisson ν tous deux thermodépendants:

$$\sigma = D(T) : \epsilon^{el} \quad (2.22)$$

3. la variation du coefficient de dilatation α est supposée négligeable devant le terme en \dot{T}

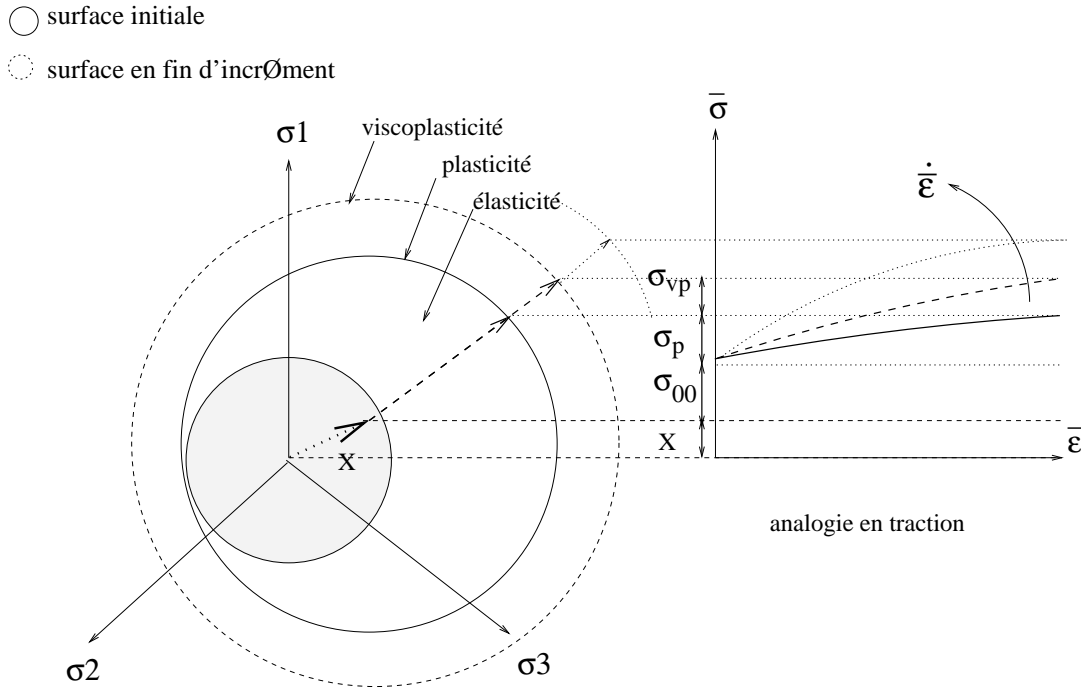


FIG. 2.3 – Représentation schématique dans l'espace des contraintes déviatoriques du passage plastique au viscoplastique [Colonna92] avec superposition de l'écroutissage cinématique et isotrope [Lematre et al.88]

où D représente le tenseur de l'élasticité, fonction des deux variables, le module de Young E et le coefficient de Poisson ν .

Comme pour le terme de couplage thermique de l'équation 2.19, on obtient par dérivation temporelle de 2.22:

$$\dot{\sigma} = D(T) : \dot{\epsilon}^{el} + \underbrace{\dot{T} D(T)^{-1} \times \frac{\partial D(T)}{\partial T}}_{\text{couplage thermique}} : \sigma. \quad (2.23)$$

En utilisant la loi de Hooke, on obtient les relations entre parties sphériques et déviatoriques:

$$\begin{cases} \dot{s} = 2\mu\dot{\epsilon}^{el} + \dot{T} \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial T} s & a), \\ \dot{p} = -\chi \text{tr} \dot{\epsilon}^{el} + \dot{T} \frac{1}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial T} p & b), \end{cases} \quad (2.24)$$

avec les relations classiques entre le coefficient de Lamé μ , le coefficient de Poisson ν , le module d'Young E , et le module de compression hydrostatique (bulk module) χ :

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad ; \quad \chi = \frac{E}{3(1-2\nu)}. \quad (2.25)$$

Nota: Étant donné le contexte des petites déformations, nous utilisons une dérivée particulière du tenseur des contraintes de Cauchy σ , et non une dérivée objective telle que celle de Jaumann par exemple.

2.2.2.2 Loi de comportement: résolution locale

On s'intéresse à l'évolution des contraintes en un point matériel donné. En tenant compte de l'incompressibilité viscoplastique, les équations 2.1, 2.3, et 2.4 permettent d'écrire:

$$\begin{cases} tr\dot{\epsilon}^{vp} &= -tr\dot{\epsilon}^{el} - tr\dot{\epsilon}^{th} + tr\dot{\epsilon}^t = 0 & a) \\ \dot{\epsilon}^t &= \dot{\epsilon}^{el} + \dot{\epsilon}^{vp} & b) \end{cases} \quad (2.26)$$

L'équation 2.26b) permettra d'établir la loi de comportement déviatorique $s = f(\dot{\epsilon}^t)$, tandis que l'équation 2.26a) permettra d'écrire la partie sphérique de la loi de comportement $p = f(tr\dot{\epsilon}^t)$ Suivant la nature de l'écoulement, et en fonction de la valeur de $\dot{\lambda}$, on aboutit aux systèmes d'équations suivantes:

En reportant les équations 2.15, 2.24a) dans l'équation 2.26b), on obtient les relations entre parties déviatoriques (on suppose à $t = 0$, $x = 0$, $s = 0$). En reportant 2.21, 2.24b) dans l'équation 2.26a), on obtient les relations entre parties sphériques.

– charge élastique: $\dot{\lambda} = 0 \Leftrightarrow \sigma_{eq} < \sigma_{00} + \sigma^p$

$$(1) \begin{cases} \dot{\epsilon}^t &= \dot{\epsilon}^{el} \\ \dot{\epsilon}^{el} &= \frac{\dot{s}}{2\mu} - \dot{T} \frac{1}{2\mu^2} \frac{\partial \mu}{\partial T} s \\ \dot{\epsilon}^{vp} &= 0 \\ \hookrightarrow \dot{s} &= 2\mu \dot{\epsilon}^t + \dot{T} \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial T} s \\ \hookrightarrow \dot{x} &= 0 \end{cases}, \quad (2.27)$$

– charge élasto-viscoplastique: $\dot{\lambda} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\epsilon}}{\sigma_{eq}} \Leftrightarrow \sigma_{eq} \geq \sigma_{00} + \sigma^p$

$$(2) \begin{cases} \dot{\epsilon}^t &= \dot{\epsilon}^{el} + \dot{\epsilon}^{vp} \\ \dot{\epsilon}^{el} &= \frac{\dot{s}}{2\mu} - \dot{T} \frac{1}{2\mu^2} \frac{\partial \mu}{\partial T} s \\ \dot{\epsilon}^{vp} &= \dot{\lambda}(s - x) \\ \hookrightarrow \dot{s} &= 2\mu[\dot{\epsilon}^t - \dot{\lambda}(s - x)] + \dot{T} \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial T} s \\ \hookrightarrow \dot{x} &= \frac{2}{3}\beta R' \dot{\epsilon}^{vp} + \dot{T} \frac{1}{R'} \frac{\partial R'}{\partial T} x \end{cases}, \quad (2.28)$$

– avec dans les deux cas, l'équation reliant les parties sphériques:

$$(3) \dot{p} = -\chi(tr\dot{\epsilon}^t - tr\dot{\epsilon}^{th}) + \dot{T} \frac{1}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial T} p \quad (2.29)$$

2.2.2.3 Expression de la loi de comportement globale: module tangent

Un calcul standard permet d'obtenir la loi de comportement:

$$\begin{aligned} \dot{s} &= 2\mu[\bar{1} - \frac{1}{3}1 \otimes 1 - \gamma(s - x) \otimes (s - x)] : \dot{\epsilon}^t + \\ &\gamma[(s - x) \otimes (s - x)] : (\frac{\partial\mu}{\mu\partial T}s - \frac{\partial R'}{R'\partial T}x)\dot{T}, \\ \text{où,} \\ \bar{1} &\text{ est un tenseur d'ordre 4 de composantes, } \frac{1}{2}[\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}], \text{ , }^4 \\ \text{et,} \\ \gamma &= \frac{1}{\frac{2}{3}[1 + \frac{1}{3\mu}(\sigma'_{eq}(\bar{\epsilon}) + R'(\bar{\epsilon}))]}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\dot{p} = -\chi(1 \otimes 1) : \dot{\epsilon}^t + (\frac{1}{\chi}\frac{\partial\chi}{\partial T}p + 3\chi\alpha)\dot{T},$$

ce qui peut s'écrire en reliant la dérivée de la contrainte $\dot{\sigma}$ à la vitesse de déformation totale $\dot{\epsilon}^t$:

$$\left. \begin{aligned} \dot{s} &= \mathcal{C}^c : \dot{\epsilon}^t + \mathcal{C}^{th}\dot{T}, \\ \dot{p} &= \bar{\mathcal{C}}^c : \dot{\epsilon}^t + \bar{\mathcal{C}}^{th}\dot{T}, \end{aligned} \right\} \quad \dot{\sigma} = \dot{s} - \dot{p}1 \quad (2.31)$$

$$\hookrightarrow \quad \dot{\sigma} = (\mathcal{C}^c - \bar{\mathcal{C}}^c) : \dot{\epsilon}^t + (\mathcal{C}^{th} - \bar{\mathcal{C}}^{th})\dot{T}.$$

On remarquera que le second terme $\mathcal{C}^{th} - \bar{\mathcal{C}}^{th}$ du système 2.31 est à relier au couplage thermique. Dans le cas isotherme, ce terme s'annule, et on retrouve la forme plus commune de la loi de comportement élasto-viscoplastique où $\mathcal{C}^c - \bar{\mathcal{C}}^c$ est défini comme le module tangent continu [Simo et al.85].

2.2.3 Résolution locale incrémentale

Il existe deux approches pour résoudre l'équation d'équilibre 2.1 à partir de sa formulation faible:

- la première consiste à dériver l'équation d'équilibre et à résoudre en $\dot{\sigma}$ en utilisant la loi de comportement définie par le système 2.31. Cette méthode est rarement utilisée.
- la méthode la plus répandue formule le problème sous forme incrémentale; elle consiste à utiliser la loi de comportement intégrée à partir d'un schéma numérique incrémental, qui consiste à résoudre pour chaque incrément de temps le système 2.31.

2.2.3.1 Méthode numérique d'intégration du problème THEVP:

Il existe différents schémas d'intégration temporelle. Les méthodes Runge-Kutta sont les plus performantes mais sont très coûteuses en temps de calcul. La méthode généralement retenue est la θ -méthode. On fait l'hypothèse suivante sur les dérivées à l'instant

4. on indique par \otimes le produit tensoriel, tel que:
 $(n \otimes n)_{ijkl} = n_{ij}n_{kl}$, n_{ij} sont les composantes du tenseur n .

$$t_\theta = t + \theta \Delta t:$$

$$\dot{y}_\theta = \frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = (1 - \theta)\dot{y}_n + \theta\dot{y}_{n+1} \quad (2.32)$$

On applique alors la θ -méthode à \dot{s} , \dot{p} , et \dot{x} pour aboutir à l'expression de la loi de comportement discrétisée suivante:

Connaissant s_n , p_n , x_n , et $\dot{\lambda}_n$ à l'instant t_n , trouver s_{n+1} , p_{n+1} , x_{n+1} , et $\dot{\lambda}_{n+1}$ à l'instant t_{n+1} où $\dot{\epsilon}_{n+1}(v_{n+1})$ est supposé connue (sous l'hypothèse des déformations constantes au cours de l'incrément):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{s_{n+1} - s_n}{\Delta t} = 2\theta\mu_{n+1}(\dot{\epsilon}_{n+1}^t - \dot{\lambda}_{n+1}(s_{n+1} - x_{n+1}) + 2(1 - \theta)\mu_n(\dot{\epsilon}_n^t - \dot{\lambda}_n(s_n - x_n)) \\ + \frac{\mu_{n+1} - \mu_n}{\mu_n \Delta t} s_n \quad ; 5 \\ \frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} = -\theta\chi_{n+1}(tr(\dot{\epsilon}_{n+1}^t) - 3\alpha\dot{T}_{n+1}) - (1 - \theta)\chi_n(tr(\dot{\epsilon}_n^t) - 3\alpha\dot{T}_n) \\ + \frac{\chi_{n+1} - \chi_n}{\chi_n \Delta t} p_n \quad ; 6 \\ \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} = \frac{2}{3}\beta\theta R'_{n+1}\dot{\lambda}_{n+1}(s_{n+1} - x_{n+1}) + \frac{2}{3}(1 - \theta)\beta R'_n\dot{\lambda}_n(s_n - x_n) + \frac{R'_{n+1} - R'_n}{R'_n \Delta t} x_n \quad ; 7 \\ 0 \leq \theta \leq 1 \end{array} \right. \quad (2.33)$$

La question du choix de la valeur de θ peut se poser. [Gratacos91] a montré qu'il existait une valeur optimale de θ en fonction de $\dot{\epsilon}_{n+1}(v_{n+1})$, et a proposé une méthodologie de la résolution du système précédent en optimisant la valeur de θ . Cette méthode permet de minimiser l'erreur d'intégration, mais reste coûteuse et justifiée en grande déformation, ce qui n'est pas notre cas.

– **Choix de la valeur de θ :**

La valeur de $\theta = 1$ correspond à un schéma purement implicite qui est un compromis entre convergence et coût de calcul [Gay95].

La méthode se ramène au prédicteur élastique avec retour radial (*figure 2.4*):

La contrainte solution est obtenue par la projection de la contrainte estimée élastique (prédicteur) sur la surface de charge et selon la normale à celle-ci (retour radial).

– **La méthode implicite :**

La résolution des équations de comportement, avec $\theta = 1$, se ramène à la résolution du système suivant dont les inconnues sont s_{n+1} , p_{n+1} , x_{n+1} , $\dot{\lambda}_{n+1}$:

depuis les équations 2.12 et 2.15, on obtient pour ΔR l'expression suivante:

5. $\mu_{i+1} = \mu(T_{i+1})$ désigne la valeur de μ prise pour la valeur de la température $T_{i+1} = T(t_{i+1})$.

6. $\chi_{i+1} = \chi(T_{i+1})$ désigne la valeur de χ prise pour la valeur de la température T_{i+1} .

7. $R'_{i+1} = R'(\epsilon_{i+1}, T_{i+1})$ désigne la valeur de R' prise pour la valeur de la température T_{i+1} .

- surface initiale
 ○ surface en fin d'incrément

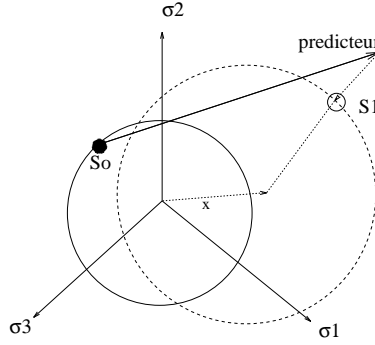


FIG. 2.4 – Interprétation de la méthode du prédicteur élastique avec retour radial

$$\beta R'(\bar{\epsilon}_{n+1}, T_{n+1}) \frac{2}{3} \Delta t \dot{\lambda}_{n+1} = R'(\bar{\epsilon}_{n+1}, T_{n+1}) \frac{\Delta t}{\sigma_{eq}} \dot{\epsilon}_{n+1} = \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}}, \quad (2.34)$$

$$\Delta R = \beta(R(\bar{\epsilon}_{n+1}, T_{n+1}) - R(\bar{\epsilon}_n, T_{n+1})).$$

$$\left\{ \begin{array}{l} s_{n+1}(1 + 2\mu_{n+1}\Delta t \dot{\lambda}_{n+1}) = Gs_n + 2\mu_{n+1}\Delta t \dot{\epsilon}_{n+1}^t + 2\mu_{n+1}\Delta t \dot{\lambda}_{n+1}x_{n+1}, \\ x_{n+1} = Fx_n + \frac{2}{3}\beta R'_{n+1}\Delta t \dot{\lambda}_{n+1}(s_{n+1} - x_{n+1}) = \frac{Fx_n + \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}}s_{n+1}}{1 + \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}}}, \\ p_{n+1} = Ip_n + \Delta t[-\chi_{n+1}(tr(\dot{\epsilon}_{n+1}^t) - 3\alpha \dot{T}_{n+1})], \\ (s_{n+1} - x_{n+1}) : (s_{n+1} - x_{n+1}) = \frac{2}{3}\sigma_{eq}^2(\bar{\epsilon}_{n+1}, \Delta \bar{\epsilon}_{n+1}), \\ \sigma_{eq} = \sigma_{00n+1} + (1 - \beta)H_{n+1}\bar{\epsilon}_{n+1}^{n_{n+1}} + K(\bar{\epsilon}_{n+1} - \bar{\epsilon}_n)^m \Delta t^{-m}, \end{array} \right. \quad 5 \quad (2.35)$$

Partant d'un état à l'équilibre où s_n , p_n , x_n , $\dot{\lambda}_n$ sont connus, on va chercher $\dot{\lambda}_{n+1}$. La résolution de ce système se fait *en forçant* la consistance plastique, de manière à chercher la solution plastique qui satisfasse le critère de Von-Mises 2.11:

$$\frac{3}{2}(s_{n+1} - x_{n+1}) \otimes (s_{n+1} - x_{n+1}) = \sigma_{eq}, \quad (2.36)$$

en remplaçant s_{n+1} , x_{n+1} des équations 2.35 dans l'équation de 2.36 consistance plastique, on obtient une équation en $\Delta \bar{\epsilon} = \dot{\epsilon} \Delta t$ solution du problème élasto-viscoplastique tel que $g(\Delta \bar{\epsilon}) = 0$

$$g(\Delta \bar{\epsilon}) = \sigma_{eq}(\bar{\epsilon}_{n+1}, \Delta \bar{\epsilon}_{n+1}) + 3\mu_{n+1}\Delta \bar{\epsilon} + \Delta R - B_o, \quad (2.37)$$

4. $G = \frac{\mu_{n+1}}{\mu_n}$, $F = \frac{R(\bar{\epsilon}_n, T_{n+1})'}{R(\bar{\epsilon}_n, T_n)'}$ adaptation thermique pour un même $\bar{\epsilon}$, et $I = \frac{\chi_{n+1}}{\chi_n}$. Par convention n désigne le paramètre au début de l'incrément, $n+1$ désigne le paramètre en fin d'incrément

en posant $s_{n+1}^T = Gs_n + 2\mu_{n+1}\Delta e_{n+1}^t$ le prédicteur élastique et,

$$B_o = \sqrt{\frac{3}{2}(s_{n+1}^T - Fx_n) : (s_{n+1}^T - Fx_n)}.$$

La fonction $g(\Delta\bar{\epsilon})$ donnée par l'équation 2.37 a les caractéristiques nécessaires et suffisantes pour assurer l'unicité de la solution de $g = 0$ pour tout écrouissage positif [Gratacos91], [Simo et al.85], [Krieg et al.76].

L'algorithme de résolution du retour radial que nous avons utilisé est résumé dans le *tableau* 2.1, il permet d'obtenir les inconnues s_{n+1} , x_{n+1} , et $\Delta\bar{\epsilon}$ solutions du problème THEVP [Simo et al.85]. La *figure* 2.5 est une représentation graphique de l'algorithme présenté dans le *tableau* 2.1. La relation sur la pression est linéaire en p et sera immédiatement intégrée.

<hr/>	
(i) Calculer le prédicteur élastique, $s_{n+1}^T = Gs_n + 2\mu_{n+1}\Delta e_{n+1}^t$, $B = s_{n+1}^T - Fx_n$.	
(ii) Calculer B_o , $B_o = [\frac{3}{2}B : B]^{\frac{1}{2}}$.	itérations <i>locales</i> : condition de consistance.
$\sigma_{\theta\theta} + \sigma^p(\bar{\epsilon}_n) < B_o$ alors, sinon aller à (v),	(i) $\bar{\epsilon}_{n+1}^k = \bar{\epsilon}_{n+1}^{k+1} + \Delta\bar{\epsilon}^k$.
(iii) trouver $\Delta\bar{\epsilon}$ par k itérations <i>locales</i> → Calculer la déformation équivalente à t_{n+1} , $\bar{\epsilon}_{n+1} = \bar{\epsilon}_n + \Delta\bar{\epsilon}$.	(ii) $g' = R'(\bar{\epsilon}_{n+1}^{k+1}) + \sigma'_{eq}(\bar{\epsilon}_{n+1}^{k+1}) + 3\mu_{n+1}$
(iv) Calculer les contraintes x et s , $x_{n+1} = Fx_n + \frac{\frac{\Delta R}{\sigma_{eq}}B}{1 + 2\mu_{n+1}\Delta\lambda + \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}}},$ $s_{n+1} = x_{n+1} + \frac{B}{1 + 2\mu_{n+1}\Delta\lambda + \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}}}.$ $\sigma_{n+1} = s_{n+1} + p_{n+1}1$	(iii) $\Delta\bar{\epsilon}^{k+1} = \Delta\bar{\epsilon}^k - \frac{g}{g'}$
(v) $x_{n+1} = x_n$, $s_{n+1} = s_{n+1}^T$, $\Delta\bar{\epsilon} = 0$	(iv) si $\ g\ > \text{Tolérance}$ alors $k \leftarrow k + 1$ et aller à (i)
	(v) sinon $\Delta\bar{\epsilon}^{k+1}$ solution
	$\Delta\lambda = \frac{3}{2} \frac{\Delta\bar{\epsilon}^{k+1}}{\sigma_{eq}}$ <hr/> $\sigma'_{eq} = \underbrace{\frac{\partial\sigma_{eq}}{\partial\bar{\epsilon}}}_{\text{plastique}} + \underbrace{\frac{1}{\Delta t} \frac{\partial\sigma_{eq}}{\partial\Delta\bar{\epsilon}}}_{\text{visqueux}}$

TAB. 2.1 – *algorithme de retour radial, avec écrouissage non-linéaire cinématique et/ou isotrope* [Simo et al.85].

– **Transition élasto-viscoplastique/élastique:**

Différents cas de transition de comportement sont envisageables pour un incrément de déformation Δe^t donné. Ces différents cas sont tous représentés sur la *figure* 2.6.

Le type de transition en un point peut être alors déduit des inégalités suivantes:

- a) $\sigma^{seuil} + \sigma^p(\bar{\epsilon}_n) > B_o$ la déformation est purement élastique (cas 1, 2, 4)
- b) $\sigma^{seuil} + \sigma^p(\bar{\epsilon}_n) < B_o$ la déformation est élastoplastique. La déformation peut être viscoplastique (cas 5), soit élastique puis élasto-viscoplastique (cas 3).

Remarque:

Comme l'a fait remarquer [Gratacos91], cette formulation ne permet pas les transi-

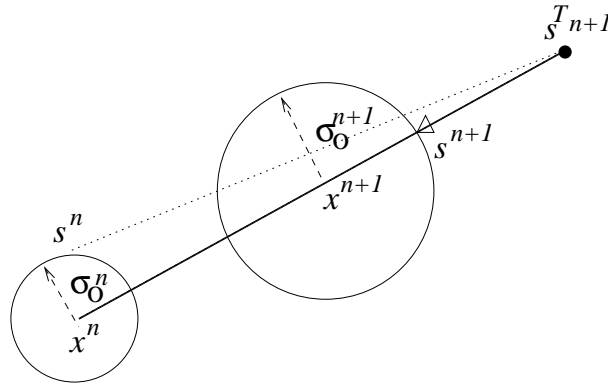


FIG. 2.5 – Représentation graphique du retour radial du tableau 2.1.

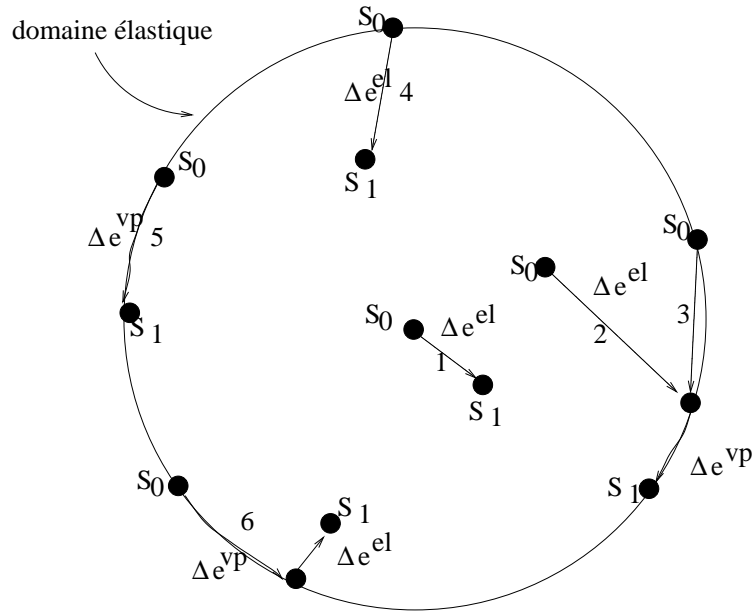


FIG. 2.6 – Représentation des divers incréments possibles, avec ou sans transition [Gratacos91].

tions, sur un incrément de calcul, du comportement viscoplastique vers un comportement élastique (cas 6). En effet partant d'un état de contrainte et de déformation en régime élasto-viscoplastique, le retour dans le domaine élastique se fera à la transition entre deux incréments (cas 4). Les transitions seront gérées correctement si le pas de temps est suffisamment faible lors de la transition.

– **Problème variationnel: module tangent consistant**

Pour la résolution du problème global, il est nécessaire de connaître l'expression du module tangent, c'est à dire:

$$\frac{\partial s}{\partial \dot{\epsilon}^i}. \quad (2.38)$$

Ce terme peut être obtenu à partir du module tangent continu défini par l'équation 2.30. [Nategaal82] et [Simo et al.85] ont mis en évidence l'importance du choix d'un schéma d'intégration du module tangent cohérent avec celui utilisé pour intégrer les

équations locales du *tableau 2.1*. On définit un module tangent discret implicite qui sera *asymptotiquement consistant* avec le modèle d'intégration du problème THEVP:

$$\mathcal{C}_{n+1}^d = \frac{\partial s_{n+1}(s_n, x_n, \bar{\epsilon}^{vp}, \Delta e^t)}{\partial \Delta \epsilon_{n+1}^t} \quad (2.39)$$

Après calcul (le lecteur pourra se référer à [Simo et al.85] pour le calcul), le module tangent discret implicite, consistant avec l'algorithme de retour radial, pour un écrouissage non-linéaire isotrope et cinématique, est le suivant:

$$\mathcal{C}_{n+1}^d = 2\mu_{n+1}\alpha[\bar{1} - \frac{1}{3}1 \otimes 1] - \bar{\gamma}(s - x)_{n+1} \otimes (s - x)_{n+1}, \quad (2.40)$$

où α , $\bar{1}$, et $\bar{\gamma}$ sont donnés par:

$$\begin{aligned} \bar{1}_{ijkl} &= \frac{1}{2}[\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}], \\ \alpha &= \frac{(1 + \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}})}{(1 + 2\mu_{n+1}\Delta\lambda + \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}})}, \\ \bar{\gamma} &= \frac{9(1 + \frac{\Delta R}{\sigma_{eq}}) - 6\Delta\lambda(R' + \sigma'_{eq})}{3\mu_{n+1} + R' + \sigma'_{eq}}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

On retrouve le module tangent élastoplastique défini par [Simo et al.85], les termes relatifs à la thermique étant pris en compte par la résolution de s et x lors du retour radial. Le module tangent discret s'éloigne du module tangent continu. Dans le cas d'un grand pas de temps, l'utilisation du module tangent continu peut entraîner une non-convergence du système de résolution global.

2.2.3.2 Cas d'un cycle uniaxial: modèle monodimensionnel

A titre d'exemple, nous proposons des tests monodimensionnels pour valider l'intégration de la loi de comportement, et tester l'influence des paramètres tels que la proportion d'écrouissage cinématique, ou l'influence de la vitesse de déformation. Pour optimiser la validation, nous avons imposé des chemins complexes de déformation et de température couplés; la résolution de la loi de comportement ne peut se faire alors que de manière *semi-analytique*. La méthode du retour radial présentée dans la partie 2.2.2.2 et implantée dans Forge2 et Forge3 a été comparée aux résultats fournis par le logiciel SiDoLo de référence.

Le modèle SiDoLo s'exprime à l'aide de deux groupes de relations:

$$\frac{dY(t)}{dt} = F(t, Y, A, Z); \quad Z(t) = G(t, Y, A). \quad (2.42)$$

Ce système d'équation est utilisé pour représenter la loi de comportement monodimensionnelle thermo-élasto-viscoplastique de la manière suivante:

1. Équations du modèle 1D (implémentées dans SiDoLo):

- loi de comportement

$$\begin{aligned}
 t = 0, \quad & \begin{aligned} x_{11} &= 0, \\ \bar{\epsilon} &= 0, \\ T_0 &= T0, \\ T_{ref} &= 0, \end{aligned} \\
 t \geq 0, \quad & \begin{aligned} \epsilon_{11}^{th} &= \alpha(T - T_{ref}) - \alpha(T_0 - T_{ref}), \\ \sigma_{11} &= E(T)(\epsilon_{11}^t - \epsilon_{11}^{vp} - \epsilon_{11}^{th}), \\ s_{11} - x_{11} &= \frac{2}{3}(\sigma_{11} - x_{11}), \\ \sigma_{eq} &= [\frac{3}{2}(s_{11} - x_{11})^2]^{\frac{1}{2}} = \|\sigma_{11} - \frac{3}{2}x_{11}\|, \\ R &= (1 - \beta)H(T)\bar{\epsilon}^{n(T)}, \end{aligned} \\
 \sigma_{eq} - R < 0 \quad & \text{alors,} \\
 & \begin{aligned} \dot{\bar{\epsilon}} &= 0, \\ \dot{\epsilon}_{11}^{vp} &= 0, \\ \dot{x} &= 0, \end{aligned} \\
 \text{sinon,} \quad & \begin{aligned} \dot{\bar{\epsilon}} &= \frac{(\sigma_{eq} - (\sigma_{00}(T) + \sigma^p(T)))^{\frac{1}{m(T)}}}{K(T)^{\frac{1}{m(T)}}}, \\ \dot{\epsilon}_{11}^{vp} &= \frac{3}{2} \frac{\sigma_{11} - x_{11}}{\sigma_{eq}} \dot{\bar{\epsilon}}, \\ \dot{x} &= \frac{2}{3} R'(\bar{\epsilon}, T) \dot{\epsilon}^{vp} + \dot{T} \frac{1}{R'} \frac{\partial R'}{\partial T} x, \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

– chargement imposé

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{11}^{vp} &= \epsilon_{11}^{vp}(t), \\
 \dot{T} &= \dot{T}(t).
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

L'ensemble des données du matériau figure dans le *tableau 2.2* (données proches des valeurs de l'austénite pour un acier eutectoïde).

$T(^{\circ}C)$	$\sigma_{00}(\text{MPa})$	$H(\text{MPa})$	n	$K(\text{MPa})$	m
600.	21.	300	0.53	73.	0.15
900.	15.	100.	0.53	50.	0.15

$T(^{\circ}C)$	$E(\text{MPa})$	ν	α
600	200.E3	0.33	21.4D-06
900	150.E3	0.33	21.4D-06

TAB. 2.2 – Données du cas test SiDoLo/Forge.

2. Traction-compression isotherme:

La *figure 2.7* présente un essai de traction-compression lent en condition isotherme.

L'objectif est de mettre en évidence l'effet *Baushinger* en faisant varier le paramètre β :

- (a) $\beta = 0$, écrouissage purement isotrope: pas d'effet Baushinger;
- (b) $\beta = 0.5$, écrouissage mixte isotrope et cinématique non-linéaire: effet Baushinger mixte;
- (c) $\beta = 1$, écrouissage purement cinématique non-linéaire: effet Baushinger;

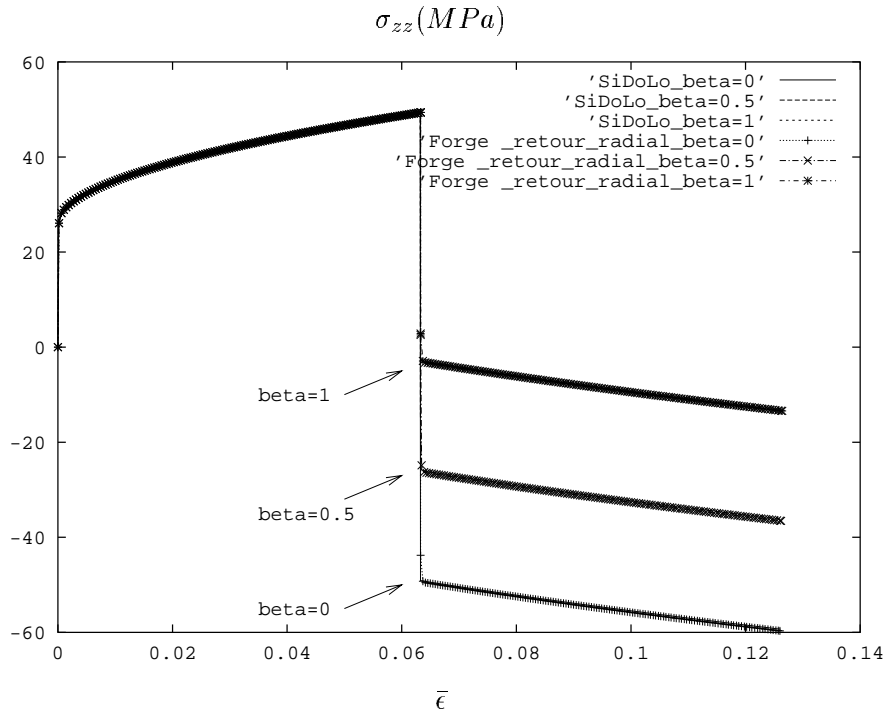


FIG. 2.7 – Influence du paramètre β sur la loi d'écrouissage en traction-compression. Comparaison SiDoLo/Forge (notre étude).

L'accord entre la méthode du retour radial et SiDoLo est parfait, et ce quelque soit la valeur du coefficient β . La transition plastique-élastique-plastique lors du passage de l'état de traction en état de compression est rigoureusement reproduite par la méthode du retour radial et permettra de calculer correctement ce type de transition lors du refroidissement d'une pièce. La proportion d'écrouissage cinématique est fixée par la valeur de β . La loi de comportement permettra en modifiant seulement la valeur de β de rendre compte de l'effet *Baushinger*.

3. Traction compression anisotherme avec relaxation:

Pour complexifier le problème, nous effectuons un cycle complet traction-compression-traction représenté sur la *figure 2.8a*), avec une traction rapide pour mettre en évidence les effets visqueux (i.e sensibilité à la vitesse de déformation). Le chargement mécanique, est accompagné d'un chargement thermique représenté sur la *figure 2.8b*) pour prendre en compte la variation des coefficients avec la température. Pour ce test nous avons choisi $\beta = 0.5$ afin d'avoir les deux composantes d'écrouissage. La contrainte σ_{11} solution du problème est représentée sur la *figure 2.9*. Les données du

test sont les suivantes:

temps (s)	ϵ_{11}	Température (°C)
0	0	900
200	0.095	800
400	0	700
410	0.095	600
1000	0.095	600

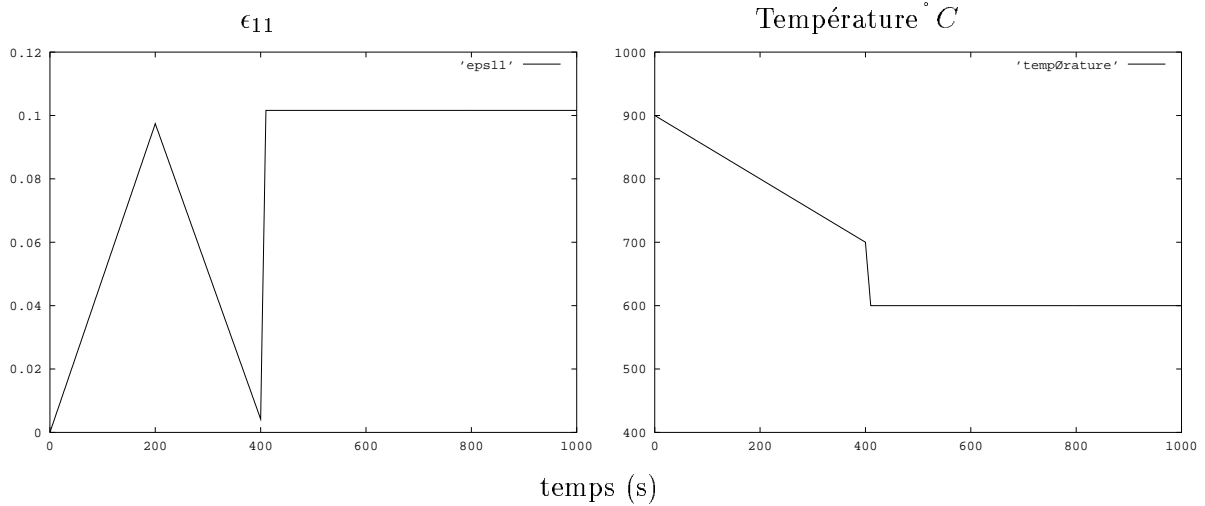


FIG. 2.8 – *Chargement a) mécanique ϵ_{11} , b) thermique T , en fonction du temps.*

Les résultats montrent une très bonne corrélation entre SiDoLo et Forge, ceci permet de valider la résolution des équations de la loi de comportement par une méthode de retour radial. Un module tangent constant permet d'utiliser des grands pas de temps, en respectant correctement la relation de consistance plastique. La *figure 2.10* montre l'étape de traction rapide pour divers pas de temps. On remarque que la transition charge élastique-élastoviscoplastique reste stable lorsque le pas de temps augmente.

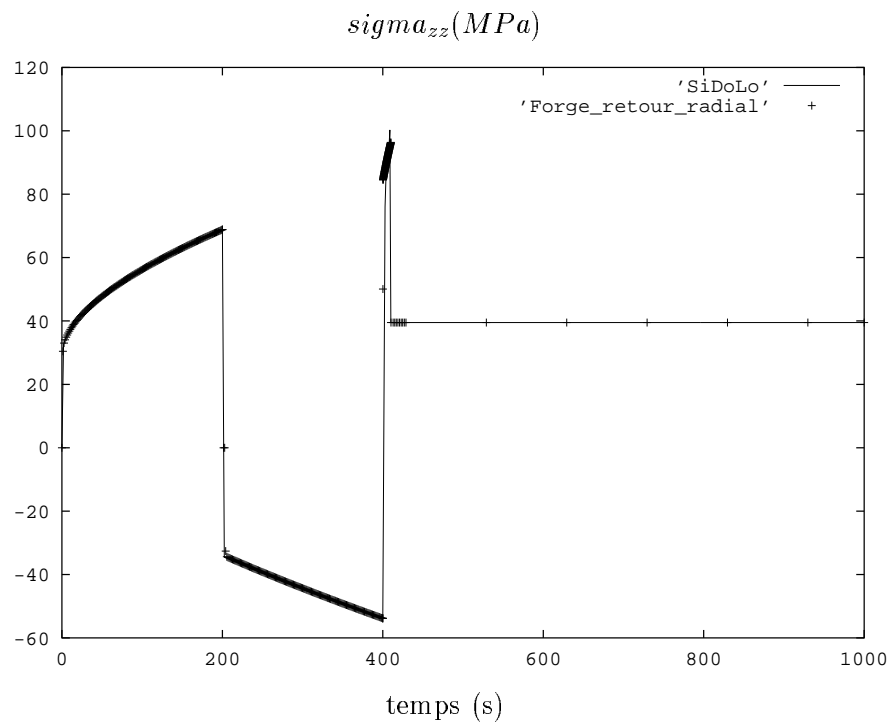


FIG. 2.9 – *Comparaison SiDoLo/Forge pour le cas test traction-compression-traction rapide-relaxation.*

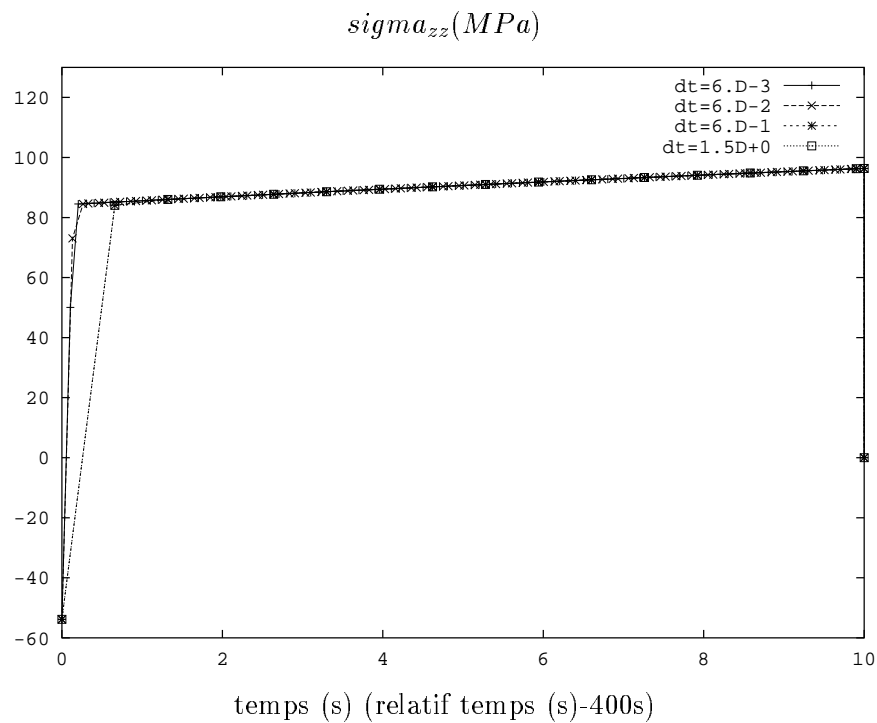


FIG. 2.10 – *Influence du pas de temps sur la transition élastique-élastoviscoplastique.*

2.2.4 Formulation faible continue du problème mécanique

En fonction de ce qui vient d'être présenté, le problème mécanique complet du traitement thermique comprend d'une part l'équation d'équilibre 2.1, à laquelle il faut rajouter l'équation de comportement THEVP 2.31 qui relie le déviateur des contraintes à la vitesse de déformation, et l'équation d'incompressibilité viscoplastique .

L' équation d'équilibre mécanique:

$$\text{div } s(\dot{\lambda}(\dot{\epsilon}^t(v)), \dot{\epsilon}^t(v)) - \nabla p = 0, \quad (2.45)$$

où $s(\dot{\lambda}(\dot{\epsilon}^t(v)), \dot{\epsilon}^t(v))$ est défini par la résolution locale de la loi de comportement (cf §2.2.3).

L'équation d'incompressibilité de la partie viscoplastique des déformations:

$$\text{tr}(\dot{\epsilon})^t + \frac{\dot{p}}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2} p - 3\alpha \dot{T} = 0, \quad (2.46)$$

Les conditions aux limites:

A chaque instant, la frontière du domaine Ω se décompose comme suit:

- les noeuds dont les degrés de liberté en vitesse sont imposés: $v = v_d$ sur $\partial\Omega_d$;
- les termes de bord \vec{T} : $\sigma \cdot \vec{n} = \vec{T}$ sur $\partial\Omega_T$
- et éventuellement des plans de symétrie: flux nul $v \cdot \vec{n} = 0$, et cisssion nulle $\sigma - \sigma_n = 0$ ou $\sigma_n = \sigma \cdot \vec{n}$ sur $\partial\Omega_{sym}$;

Les conditions aux limites en vitesse seront imposées fortement, tandis que l'imposition d'un terme de bord est une condition naturelle dans la formulation élément finis.

On obtient la formulation faible des équations mixtes en vitesse et pression associée au problème mécanique en multipliant par des fonctions tests l'équation de comportement 2.45 et l'équation d'incompressibilité 2.46 et en intégrant selon une formule de Green. Le problème devient:

trouver $(v, p) \in \mathcal{V} \times \mathcal{P}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega'} s' : \dot{\epsilon}(v^*) d\Omega' - \int_{\Omega'} p' \text{tr}(\dot{\epsilon}(v^*)) d\Omega' - \int_{\partial\Omega'_T} \vec{T} \cdot v^* dS' = 0 \quad \forall v^* \in \mathcal{V} \\ \int_{\Omega'} p^* [\text{tr}(\dot{\epsilon})^t + \frac{\dot{p}}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2} p - 3\alpha \dot{T}] d\Omega' = 0 \quad \forall p^* \in \mathcal{P} \end{array} \right. \quad (v^*, p^*) \text{ définis sur } \Omega \quad (2.47)$$

$\mathcal{V} = (H^1(\Omega))^3$ l'espace de Sobolev des champs cinématiquement admissibles. $\mathcal{P} = L^2(\Omega)$, où $L^2(\Omega)$ est l'espace de Lebesgue des fonctions de carré sommable sur Ω .

L'existence et l'unicité de la solution pour ce problème sont obtenues sous les conditions du théorème de Brezzi [Arnold et al.83] dont découle la condition de *inf-sup* de stabilité. Cette condition est démontrée de façon très claire dans le chapitre 2 du livre de Brezzi et Fortin [Brezzi et al.91].

2.2.5 Discrétisation spatiale par la méthode des éléments finis

La discrétisation par éléments finis du problème de Stokes prolongé (i.e. prolongé au problème THEVP) consiste à calculer la solution de la formulation variationnelle 2.47 non plus dans les espaces continus \mathcal{V} et \mathcal{P} mais dans des sous-espaces d'approximation de dimension finie \mathcal{V}_h et \mathcal{P}_h . Ces sous-espaces sont définis par une partition du domaine Ω en une réunion d'éléments finis appelée triangularisation (par abus de langage) $\mathcal{T}(\Omega)$:

$$\Omega = \cup_{\Omega_e \in \mathcal{T}(\Omega)} \Omega_e. \quad (2.48)$$

A chaque élément Ω_e de la triangularisation, on associe des fonctions d'interpolation pour approcher les inconnues du problème v et p . Le choix des fonctions d'interpolation assure la relation suivante pour les sous-espaces de dimension finie: $V_h \subset \mathcal{V}$ et $P_h \subset \mathcal{P}$. Il faut alors chercher la solution du problème discret suivant (méthode standard de Galerkin):

Trouver $(v_h, p_h) \in (V_h \times P_h)$ tel que

$$\begin{cases} \int_{\Omega'} s(v_h) : \dot{\epsilon}(v^*) d\Omega' - \int_{\Omega'} p_h \text{tr}(\dot{\epsilon}(v^*)) d\Omega' = 0 & \forall v^* \in V_h \\ \int_{\Omega'} p^* [\text{tr}(\dot{\epsilon}(v_h)) + \frac{\dot{p}_h}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2} p - 3\alpha \dot{T}] d\Omega' = 0 & \forall p^* \in P_h \end{cases} \quad (2.49)$$

On rappelle que la relation $s = s(v_h)$ est donnée par les équations du *tableau* 2.1.

L'opération de discrétisation consiste à passer d'un problème aux dérivées partielles 2.47 à un problème discret 2.49 qui va aboutir à la construction d'un problème algébrique. Toute la difficulté réside dans le choix des espaces d'approximation V_h et P_h , autrement dit dans le choix des fonctions d'interpolation associées aux inconnues en vitesse et pression. La contrainte d'incompressibilité de l'équation 2.49 implique que l'étude de l'écoulement du métal se ramène à un problème mixte. On pourrait poser le problème uniquement en vitesse, en imposant l'incompressibilité viscoplastique par exemple par une formulation irréductible. Il est cependant plus naturel de conserver la pression comme variable inconnue du problème au même titre que la vitesse. Toutefois, l'interpolation de la nouvelle variable "pression" ne peut être choisie indépendamment du choix de l'interpolation de la variable "vitesse". La question qu'il faut se poser est la suivante: quelle interpolation de pression doit-on utiliser pour obtenir un élément compatible? Par exemple, si le degré d'interpolation de la pression est trop important comparé à celui de la vitesse, les contraintes sur le champ de vitesse admissible, pour satisfaire à la fois les équations d'équilibre et de

compressibilité, sont alors trop importantes et le champ solution sera faux. Ce phénomène est appelé le *locking* et correspond à un choix d'éléments non compatibles. Les raisons mathématiques de ce problème sont expliquées par [Arnold et al.83] pour le problème générique de Stokes, qui a formulé un critère plutôt complexe, et qui permet de s'assurer de l'unicité de la solution. Il existe une inéquation à vérifier entre v_h et p_h , dite relation de Brezzi-Babuska, où C est une constante indépendante du maillage:

$$0 < C < \inf_{v_h} \sup_{p_h} \frac{\int_{\Omega} p_h \operatorname{div} v_h dV}{\|v_h\| \|p_h\|}. \quad (2.50)$$

Cette condition impose alors les degrés d'interpolation pour les variables v_h et p_h . Cette condition est démontrée de façon très claire dans le chapitre 2 du livre de Brezzi et Fortin [Brezzi et al.91]. Nous nous contenterons dans ce document d'admettre ce résultat.

2.2.5.1 Choix du type d'élément fini mécanique

Dans le solveur viscoplastique de Forge3 (loi de comportement de Norton-Hoff), l'élément implémenté est le P1+/P1 présenté par [Arnold et al.84]. Nous avons dressé sur le *tableau 2.3* les différents tétraèdres compatibles les plus utilisés:

élément	degré d'interpolation			nombre de noeuds
	v	p	précision	
P1 + / P1	1	1	$O(h)$	4
P2/P1 _{cont}	2	1	$O(h^2)$	22
P2 + / P1 _{disc}	2	1	$O(h^2)$	31
P1/P1	1	1	pas compatible	4

TAB. 2.3 – différents éléments tétraédriques.

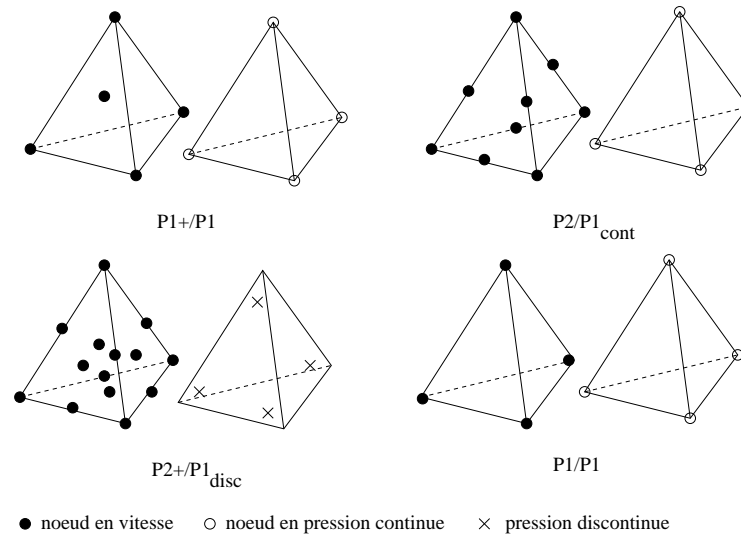


FIG. 2.11 – Eléments tétraédriques mixtes compatibles.

Une interpolation continue de la vitesse et de la pression conduit à des éléments de moindre coût de calcul. [Gay95] a comparé pour une formulation élastoplastique deux

éléments intéressants que sont le $P2/P1_{cont}$ et le $P1+/P1$. Il s'avère que l'élément $P1+/P1$ présente le meilleur compromis entre le coût de calcul et la précision des résultats.

1. Tétraèdre mixte en vitesse et pression linéaire

Le tétraèdre linéaire est un élément intéressant car à cause de son faible coût, les systèmes algébriques associés sont de faibles dimensions et sont rapidement assemblés. La formulation simpliste $P1/P1$ ne satisfait pas les conditions de compatibilité. Il faut alors s'orienter vers un élément linéaire plus robuste. Une solution rapide consiste, dans le cas de méthodes d'ordre peu élevé, à remplacer l'équation d'incompressibilité du problème 2.49 par un problème dit stabilisé que l'on peut considérer comme une simple perturbation de celui-ci [Silvester93]. Il s'agit de rajouter dans l'équation d'incompressibilité le terme:

$$\int_{\Omega'} p^* [tr(\dot{\epsilon}(v_h)) + \frac{\dot{p}_h}{\chi} - 3\alpha \dot{T}] d\Omega' - \underbrace{\beta C_h(p^* \bar{p}_h)}_{\text{terme de stabilisation}} = 0, \quad (2.51)$$

où β est le paramètre de stabilisation et C_h est une forme bilinéaire symétrique qui assure le contrôle local du gradient de pression, et qui filtre les modes parasites (modes impropres dus à l'incompatibilité de l'élément). Dans le cadre d'une interpolation linéaire et continue de la pression, il est classique de choisir une formulation globalement stabilisée avec:

$$C_h = \sum_{\Omega_e \in \mathcal{T}(\Omega)} h_{\Omega_e}^2 \int_{\Omega_e} \nabla p \nabla p^* dv, \quad (2.52)$$

où h_{Ω_e} est une taille caractéristique de l'élément Ω_e .

Une autre méthode consiste à choisir un élément enrichi (enrichissement de type h), dont le noeud central (ou degré de liberté interne) additionnel lui permet de satisfaire les conditions de compatibilité. Cette méthode a l'avantage d'être plus naturelle qu'une stabilisation brutale, et évite la détermination du paramètre β crucial pour la rapidité de convergence et la qualité de la solution [Perchatrs]. On verra par la suite que les termes issus de l'utilisation d'une technique de condensation sont de nature similaire au terme de stabilisation globale, et peuvent être assimilés à une stabilisation locale (par opposition à la stabilisation globale [Silvester93]).

2. L'élément $P1 + /P1$:

C'est l'élément mixte compatible de plus petit degré d'interpolation. C'est un élément tétraédrique linéaire où les champs de vitesse et de pression sont les suivants:

- La pression est linéaire et continue.
- La vitesse v_h se décompose en une partie linéaire v_l et une partie b correspondant à l'ajout d'un degré de liberté interne:

$$v_h = v_l + b. \quad (2.53)$$

La composante b est une correction de vitesse, qui permet d'enrichir l'élément et ainsi de satisfaire les conditions de compatibilité. Généralement la fonction d'interpolation *bulle* associée au champ b est un polynôme de degré 4 s'annulant sur la frontière de l'élément. La gestion d'un polynôme de degré 4 est très lourde en terme d'intégration, une gestion particulière de cette fonction à été proposée par [Coupez97]. Le fonction *bulle* est choisie affine par morceau sur les quatre sous-tétraèdres internes à l'élément *figure* 2.12. Les sous-espaces d'approximation (V_h, P_h) s'expriment sous la forme:

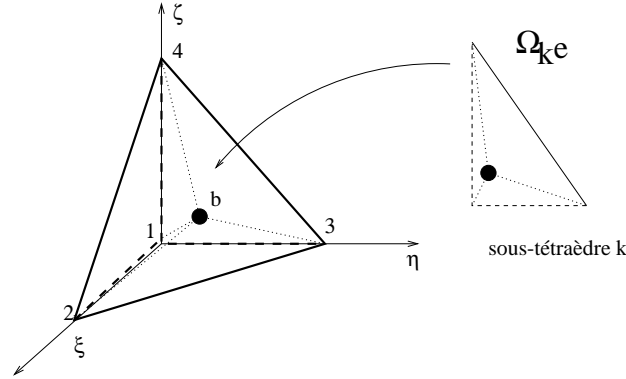


FIG. 2.12 – décomposition du tétraèdre en 4 sous tétraèdres [Coupez97]

$$\begin{aligned}
 V_h &= V_l + B_h, \\
 B_h &= \{b \in (C^0(\Omega_e))^3 \text{ et } b = 0 \text{ sur } \partial\Omega_e\}, \\
 V_l &= \{v_h \in (C^0(\Omega_e))^3 \text{ et } v_h|_{\Omega_e} \in (P^1)^3\}, \\
 P_h &= \{p_h \in (C^0(\Omega_e))^3 \text{ et } p_h|_{\Omega_e} \in (P^1)\}.
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Par conséquent, le champ de vitesse et de pression s'écrit en un point x de l'espace et compte tenu des supports des fonctions d'interpolation:

$$\begin{aligned}
 v_h(x)^l &= N_k v_k^l + b^l B; \quad k = 1..4; \quad l = 1..3,^6 \\
 p_h(x) &= N_k p_k; \quad k = 1..4,
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

où N_k sont les fonctions d'interpolation des champs linéaires vitesse et pression, B la fonction *bulle*, v_k et p_k les valeurs de vitesse et de pression nodales, b la valeur nodale associée au noeud central. On notera qu'il ne faut pas confondre cette valeur nodale b et la vitesse du noeud central v_b :

$$b^l = (v_b^l - N_k(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})v_k^l); \quad k = 1..4; \quad l = 1..3. \tag{2.56}$$

La *bulle* représente un écart de vitesse entre la vitesse au centre de l'élément tétraèdre linéaire à quatre noeuds et la vitesse au centre dans le cas de l'élément tétraédrique linéaire enrichi. On voit que cette définition donne au champ *bulle* une dimension de

6. On utilise ici la convention d'Einstein sur les indices.

deuxième ordre par rapport au champ de vitesse linéaire.

Le choix de [Coupez97] d'une fonction *bulle* affine par morceau, conduit à écrire la fonction hiérarchique B de la manière suivante (cf *figure 2.12*):

$$\begin{aligned} \text{sur 1-3-4-b } B^1 &= 4\xi \\ \text{sur 1-4-2-b } B^2 &= 4\eta \\ \text{sur 1-2-3-b } B^3 &= 4\zeta \\ \text{sur 2-4-3-b } B^4 &= 4(1 - \xi - \eta - \zeta) \end{aligned}$$

Notons que le choix d'une fonction hiérarchique continue par morceau est motivé par la simplification de l'intégration numérique associée. Un tel choix conduit à utiliser un seul point de Gauss par sous-tétraèdre. On rappelle la fonction proposée initialement par [Fortin et al.85]:

$$B = 256(1 - \xi - \eta - \zeta)\xi\eta\zeta,$$

qui nécessite évidemment un grand nombre de points d'intégration.

Remarque:

On notera que la fonction *bulle* B définie par [Coupez97] est continue par sous-tétraèdre mais que son gradient ne l'est pas (*sauts aux interfaces sous-tétraèdre/sous-tétraèdre*). Par souci de clarté dans la suite on oubliera cette décomposition et on notera seulement B sans faire référence au sous-tétraèdre considéré.

2.2.5.2 Application au problème thermo-élasto-viscoplastique THEVP

Les définitions ci-dessus des espaces utilisés permettent d'écrire le sous-problème discret associé au problème de Stokes prolongé au comportement THEVP.

trouver $v_l, b, p_h \in V_l \times B_h \times P_h$ tel que $\forall (v_l^*, b^*, p_h^*) \in V_l \times B_h \times P_h$,

$$\left\{ \begin{aligned} \int_{\Omega} s(v_l + b) : \dot{\epsilon}_l^t(v_l^*) d\Omega - \int_{\Omega} p_h \text{tr}(\dot{\epsilon}(v_l^*)^t) d\Omega &= 0 \quad \forall v_l^* \in V_l \\ \int_{\Omega} s(v_l + b) : \dot{\epsilon}_l^t(b^*) d\Omega - \int_{\Omega} p_h \text{tr}(\dot{\epsilon}(b^*)^t) d\Omega &= 0 \quad \forall b^* \in B_h \\ \int_{\Omega} p^* [\text{tr} \dot{\epsilon}^t(v_l + b) + \frac{\dot{p}_h}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2} p_h - 3\alpha \dot{T}] d\Omega &= 0 \quad \forall p^* \in P_h \end{aligned} \right. \quad (2.57)$$

Le système d'équations 2.57 est couplé à cause de la dépendance du déviateur des contraintes s avec le champ de vitesse total $v_l + b$, relation fournie par la résolution de la loi de comportement. Ce système tel quel engendre un problème algébrique où les champs inconnus v_l et b seront couplés. C'est dans ce cadre que [Gay95] a commencé au laboratoire à développer une version de Forge3 élastoplastique en formulation mixte, et [Menai95] l'a adaptée et étendue au problème élasto-viscoplastique. Nous proposons de montrer que le système 2.57 peut être découplé pour générer un problème algébrique simplifié. Notre démarche repose sur les travaux de [Coupez97] dans le cadre du problème de Stokes standard (i.e. loi viscoplastique), que nous avons étendu au problème THEVP pour aboutir à une formulation originale du $P1+/P1$, le **MINI-élément**. Pour cela, nous

allons utiliser des propriétés spécifiques au champ *bulle*, qui nous permettront de découpler les équations et de simplifier les expressions matricielles du problème algébrique.

2.2.5.3 Propriétés du champ *bulle*

1. $b \equiv 0$ sur $\partial\Omega_e$, on peut donc éliminer la *bulle* de toutes les intégrales sur $\partial\Omega_e$.
- 2.

$$\int_{\Omega} C : \dot{\epsilon}(b) d\Omega = 0, \quad C \in P0(\Omega), \quad (2.58)$$

pour tout tenseur constant C sur Ω .

preuve:

$$\int_{\Omega_e} \nabla(b)_{ij} d\Omega_e = \int_{\Omega_e} b_i \frac{\partial B}{\partial x_j} d\Omega_e, \quad (2.59)$$

soit le vecteur β_j définit comme:

$$\frac{\partial B}{\partial x_j} = \text{div} \beta_j; \quad \beta_j = \begin{pmatrix} \cdot \\ B \\ \cdot \end{pmatrix} \leftarrow j^{\text{ième}} \text{ coordonnée}, \quad (2.60)$$

ainsi avec la décomposition en sous tétraèdre, on obtient,

$$\int_{\Omega_e} \text{div} \beta_j d\Omega_e = \sum_1^4 \int_{\Omega_{ke}} \text{div} \beta_j d\Omega_{ke}, \quad (2.61)$$

ce qui peut s'écrire,

$$\int_{\Omega_e} \nabla(b)_{ij} d\Omega_e = b_i \sum_{k=1}^4 \int_{\partial\Omega_{ke}} \beta_j \cdot n_k d\Omega_{ke} = b_i 0 = 0. \quad (2.62)$$

Cela est possible car β_j s'annule sur le bord Ω_e , et est continue dans Ω_e .

Plus particulièrement, avec le sous-espace $v_l \in P^1(\Omega_e)$ choisit, on pourra écrire:

$$\int_{\Omega_e} \nabla(v_l) : \nabla(b) d\Omega_e = 0, \quad (2.63)$$

où évidemment $\nabla(v_l)$ est constant sur Ω_e . On remarquera que la démonstration ci-dessus reste identique, si on utilise l'opérateur gradient symétrique $\frac{1}{2}(\nabla + {}^t\nabla)$, au lieu de l'opérateur gradient ∇ .

2.2.5.4 Application du MINI-élément au problème THEVP

– Formulation faible du MINI-élément:

La démonstration passe par une formulation à trois champs en introduisant une nouvelle variable supplémentaire D prenant partiellement la place de $\dot{\epsilon}^t(v)$ dans l'équation d'équilibre 2.45:

$$\begin{cases} \operatorname{div} s(\dot{\lambda}(D), \dot{\epsilon}^t(v)) - \nabla p = 0, \\ + \text{équations de comportement}, \\ D = \dot{\epsilon}^t(v). \end{cases} \quad (2.64)$$

Une formulation faible de 2.64 conduit à définir la variable discrète D_h associée à la variable continue D . Notre objectif est de définir $D_h \in P^0(\Omega_e)$, ce qui revient à chercher une solution au premier ordre de 2.64. On remarque que cette approximation est tout à fait en accord avec l'ordre de l'élément $P1+/P1$ utilisé (cf *tableau 2.3*).

Au sens faible on écrira:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} D^* : (D_h - \dot{\epsilon}^t(v_h)) d\Omega &= 0, \forall D^* \in P^0(\Omega_e), \\ v_h &= v_l + b \in V_l \oplus B_h, \end{aligned} \quad (2.65)$$

et, en utilisant (2.59), on obtient,

$$\int_{\Omega_e} D^* : (D_h - \dot{\epsilon}^t(v_l)) d\Omega - \underbrace{\int_{\Omega_e} D^* : \dot{\epsilon}^t(b) d\Omega}_{=0} = 0, \forall D^* \in P^0(\Omega_e), \quad (2.66)$$

ce qui conduit à écrire (toujours au sens faible): $D_h = \dot{\epsilon}^t(v_l)$

Évidemment un remplacement total de $\dot{\epsilon}^t(v_h)$ par D n'aurait pas de sens, et conduirait à utiliser l'élément non-compatible $P1/P1$.

Ce résultat nous permet d'écrire pour la formulation faible la simplification suivante:

$$\int_{\Omega_e} s(\dot{\lambda}(D), \dot{\epsilon}^t(v)) : \dot{\epsilon}^t(v^*) d\Omega = \int_{\Omega_e} s(\dot{\lambda}(\dot{\epsilon}^t(v_l)), \dot{\epsilon}^t(v)) : \dot{\epsilon}^t(v^*) d\Omega. \quad (2.67)$$

En utilisant la décomposition 2.54, et le résultat 2.67:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} s(\dot{\lambda}(\dot{\epsilon}^t(v_l)), \dot{\epsilon}^t(v)) : \dot{\epsilon}^t(v^*) d\Omega &= \\ \int_{\Omega_e} \underbrace{(s^l(\dot{\lambda}(v_l), \dot{\epsilon}^t(v_l)))}_{\text{non-linéaire}/v_l} + \underbrace{s^b(\dot{\lambda}(v_l), \dot{\epsilon}^t(b)))}_{\text{linéaire}/b} : \dot{\epsilon}^t(v^*) d\Omega, \end{aligned} \quad (2.68)$$

où s^l est alors constant sur Ω_e et s^b considéré comme une correction *pseudo-élastique*, puisque linéaire par rapport au champ b , qui n'a de sens qu'au sens faible dans l'expression 2.68. D'après la résolution temporelle de la loi de comportement THEVP (*tableau 2.35* méthode du retour radial), on peut donner les expressions de s^l et s^b :

$$\begin{aligned}
 s_{n+1}^l &= \frac{Gs_n^l + 2\mu\Delta t\dot{\epsilon}_{n+1}^t(v_l) + 2\mu\Delta t\dot{\lambda}_{n+1}(v_l)x_{n+1}(v_l)}{(1 + 2\mu\Delta t\dot{\lambda}_{n+1}(v_l))}, \\
 s_{n+1}^b &= \frac{2\mu\Delta t\dot{\epsilon}_{n+1}^t(b)}{(1 + 2\mu\Delta t\dot{\lambda}_{n+1}(v_l))},
 \end{aligned} \tag{2.69}$$

Cette décomposition en partie linéaire et *bulle* s'applique également aux modules tangents discrets:

$$\begin{aligned}
 C_{n+1}^l &= \frac{\partial s^l}{\partial \Delta \epsilon_l^v} \Big|_{n+1} = \alpha(v_l) \left[\bar{1} - \frac{1}{3} 1 \otimes 1 \right] - \bar{\gamma}(v_l) (s^l - x)_{n+1} \otimes (s^l - x)_{n+1} \\
 C_{n+1}^b &= \frac{\partial s^b}{\partial \Delta \epsilon^b} \Big|_{n+1} = \alpha(v_l) \left[\bar{1} - \frac{1}{3} 1 \otimes 1 \right].
 \end{aligned} \tag{2.70}$$

On remarquera que dans le cas thermo-élastique, les modules tangents discrets C_{n+1}^l , et C_{n+1}^b sont identiques.

Le système 2.72 peut être simplifié par rapport au système 2.57 grâce à l'exploitation de la propriété du champ *bulle* 2.59.

$$\int_{\Omega} s^v : \dot{\epsilon}(b^*) d\Omega = \int_{\Omega} s^b : \dot{\epsilon}(v_l^*) d\Omega = 0, \tag{2.71}$$

En utilisant ce résultat, le système 2.57 s'écrit sous une forme plus simple, et surtout découplé entre les champs inconnus v_l et b :

trouver $(v_l, b, p_h) \in V_l \times B_h \times P_h$ tel que $\forall (v_l^*, b^*, p_h^*) \in V_l \times B_h \times P_h$,

$$\left\{ \begin{aligned}
 \int_{\Omega} s^l : \dot{\epsilon}_l^t(v_l^*) d\Omega &- \int_{\Omega} p_h \text{tr}(\dot{\epsilon}(v_l^*)^t) d\Omega &= 0 & \forall v_l^* \in V_l \\
 \int_{\Omega} s^b : \dot{\epsilon}_l^t(b^*) d\Omega &- \int_{\Omega} p_h \text{tr}(\dot{\epsilon}(b^*)^t) d\Omega &= 0 & \forall b^* \in B_h \\
 \int_{\Omega} p^* [\text{tr} \dot{\epsilon}^t(v_l + b) + \frac{\dot{p}_h}{\chi} - \frac{\dot{\chi}}{\chi^2} p_h - 3\alpha \dot{T}] d\Omega &&= 0 & \forall p^* \in P_h.
 \end{aligned} \right. \tag{2.72}$$

ainsi le système 2.72 est découplé en v_l et b .

– Formulation algébrique du MINI-élément:

La forme algébrique est la représentation matricielle du système 2.72. Ce système peut s'écrire synthétiquement sous la forme suivante, où chaque vecteur R remplace l'intégrale correspondante du système 2.72:

$$\begin{aligned}
 R^v(v_l, p_h) &= R^{vv} + 0 + R^{vp} = 0 \\
 R^b(b, p_h) &= 0 + R^{bb} + R^{bp} = 0 \\
 R^p(v_l, b_h, p_h) &= R^{pv} + R^{pb} + R^{pp} + R^T = 0
 \end{aligned} \tag{2.73}$$

On notera la présence des termes nuls en raison de la simplification MINI-élément.

avec:

$$\begin{aligned}
 R_{nk}^{vv} &= \int_{\Omega_h} s_{ij}^l E_{ijkn}^l dV, \\
 R_{nk}^{vp} &= - \int_{\Omega_h} p_m N_m \frac{\partial N_n}{\partial x_k} dV, \\
 R_k^{bb} &= \int_{\Omega_h} s_{ij}^b E_{ijk}^b dV, \\
 R_k^{bp} &= - \int_{\Omega_h} p_m N_m \frac{\partial B}{\partial x_k} dV, \\
 R_{nk}^{pv} &= - \int_{\Omega_h} N_k \left[\frac{\partial N_n}{\partial x_j} v_{jn} + \frac{\partial B}{\partial x_j} b_j \right] dV, \\
 R_k^{pp} &= - \int_{\Omega_h} N_k N_m \frac{p_m - p_m^0}{\chi} dV, \\
 R_k^T &= \int_{\Omega_h} N_k N_m \alpha \dot{T}_m dV.
 \end{aligned} \tag{2.74}$$

On utilise la convention de sommation sur l'indice m répété.

$n, m \in [1, 4]$ = nombre de noeuds par élément.

$k, j \in [1, 3]$ = composante des vecteurs.

Dans les équations 2.74, D est l'opérateur habituel, pour rappel: $D_{ijkn}^l = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial N_n}{\partial x_j} \delta_{ik} + \frac{\partial N_n}{\partial x_i} \delta_{jk} \right)$, $D_{ijk}^b = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial B}{\partial x_j} \delta_{ik} + \frac{\partial B}{\partial x_i} \delta_{jk} \right)$.

La dépendance de R^{vv} en fonction du champ de vitesse linéaire v_l rend le problème fortement non-linéaire. Le système est résolu par un algorithme de linéarisation de Newton-Raphson déjà utilisé dans *Forge3 version viscoplastique*. Si on pose:

$$K^{xy}(x, y) = \frac{\partial R^{xy}(x, y)}{\partial y} \tag{2.75}$$

où $(xy) = \{(vv); (vp); (pv); (bb); (bp); (pb)\}$.

Ceci conduit au système algébrique suivant:

$$\begin{bmatrix} K^{vv} & 0 & K^{vp} \\ 0 & K^{bb} & K^{bp} \\ {}^t K^{vp} & {}^t K^{bp} & K^{pp} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \delta v \\ \delta b \\ \delta p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R^v \\ R^b \\ R^p \end{pmatrix} \tag{2.76}$$

où δv , δb , δp sont les solutions incrémentales pour les champs inconnus v_l , b and p . Pour chaque itération de Newton-Raphson on écrira jusqu'à convergence:

$$\begin{aligned}
 v_{n+1} &= v_n + \delta v, \\
 b_{n+1} &= b_n + \delta b, \\
 p_{n+1} &= p_n + \delta p,
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

Par une technique de condensation locale, les degrés de liberté, pour chaque élément, liés à la *bulle* sont éliminés:

$$\delta b_e = -(K_e^{bb})^{-1}[R_e^b - K_e^{bp}\delta p_e], \quad (2.78)$$

on obtient ainsi une formulation mixte en vitesse-pressure avec pour seules inconnues les valeurs nodales des trois composantes de la vitesse et des pressions en chaque sommet des tétraèdres. Les contributions élémentaires du sous-système associé à chaque élément se réduisent alors à,

$$\begin{bmatrix} K_e^{vv} & K_e^{vp} \\ {}^t K_e^{vp} & K_e^{pp} - C_e \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \delta v_e \\ \delta p_e \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_e^v \\ R_e^p - {}^t K_e^{bp} (K_e^{bb})^{-1} R_e^b \end{pmatrix}$$

où, $C_e = {}^t K_e^{bp} (K_e^{bb})^{-1} K_e^{bp}$ est la matrice de condensation locale de la *bulle*. En utilisant la linéarité de R_e^p , et surtout celle de R_e^b dans l'équation 2.74,

$$\begin{aligned} K_{e_{lk}}^{bb} &= \frac{\partial R_{e_l}^{bb}}{\partial b_k} = \int_{\Omega_h} E_{ijk}^b C_{ijpq}^b D_{pqn}^b dV, \\ K_{e_{lk}}^{bp} &= \frac{\partial R_{e_l}^{bp}}{\partial p_k} = - \int_{\Omega_h} N_k \frac{\partial B}{\partial x_l} dV, \end{aligned} \quad (2.79)$$

soit,

$$\begin{aligned} R_{e_l}^{bb} &= K_{e_{lk}}^{bb} b_k, \\ R_{e_l}^{bp} &= K_{e_{lk}}^{bp} p_k, \end{aligned} \quad (2.80)$$

On peut écrire les résidus de la manière suivante,

$$\begin{aligned} R_e^b &= K_e^{bb} b_e + K_e^{bp} p_e, \\ R_e^p &= R_e^{pv} + R_e^{pp} + R_e^T + {}^t K_e^{bp} b_e, \end{aligned} \quad (2.81)$$

le système algébrique peut être alors simplifié, où le champ *bulle* est totalement éliminé et n'apparaît plus dans aucune des expressions matricielles ou vectorielles. La contribution de la *bulle* est présente de manière sous-jacente par l'intermédiaire de sa raideur K_e^{bb} dans la matrice de condensation C_e :

$$\begin{bmatrix} K_e^{vv} & K_e^{vp} \\ {}^t K_e^{vp} & K_e^{pp} - C_e \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \delta v_e \\ \delta p_e \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_e^v \\ R_e^{pv} + R_e^{pp} + R_e^T - C_e p_{e,n} \end{pmatrix}. \quad (2.82)$$

Par conséquent la nécessité de reconstruire le champ *bulle* n'est plus utile comme dans [Menai95] et [Gay95]. La *bulle* n'apporte que des corrections d'ordre 2 alors que l'approximation éléments finis recherchée est en théorie d'ordre 1. Par conséquent il est inutile d'en tenir compte en dehors du terme de stabilisation C_e . Elle peut par exemple, être négligée lors du calcul du tenseur des contraintes. L'exploitation sous la forme MINI-élément du tétraèdre linéaire $P1 + /P1$ conduit à une réduction considérable du temps de calcul; d'une part en éliminant la construction du champ *bulle* et d'autre part en utilisant un seul point de Gauss, au lieu de quatre dans le

7. La notation X_e correspond aux calculs restreints aux degrés de liberté présents sur l'élément Ω_e . Les matrices locales sont à présent de dimension (16×16) et les vecteurs de dimension (16) .

cas du système couplé en v_l et b .

Au regard du système 2.82, on peut assimiler la formulation MINI-élément à une méthode de stabilisation déjà évoquée et utilisée par [Silvester93]. Cette formulation présente l'avantage de calculer localement le terme de stabilisation, et par conséquent, elle correspond à une optimisation des méthodes de stabilisation.

Remarque:

La résolution du système 2.82 est effectuée par une méthode itérative de type résidu minimal pré-conditionné. Les meilleurs résultats sont obtenus en utilisant un pré-conditionneur par *factorisation incomplète de Cholesky* IC(0) [Perchat et al.99]. Nous renvoyons le lecteur à la thèse de [Marie97] pour de plus amples informations sur la résolution numérique du problème à partir du système 2.82.

– **Stabilité des méthodes mixtes: le patch-test**

Le patch-test est souvent utilisé pour discuter de la compatibilité d'un élément. Cet exemple que nous proposons met en évidence l'utilisation d'une méthode mixte. Une représentation intéressante de la stabilité des méthodes mixtes, est le cas de l'élasticité incompressible (quasi-incompressibilité) [Zienkiewicz et al.89]. L'incompressibilité est obtenue en choisissant le coefficient de Poisson $\nu = 0.499$, ce qui se traduit par la relation suivante entre la trace du champ de déformation et la pression:

$$tr(\epsilon)^t = \frac{p}{\chi}, \quad \chi \rightarrow \infty, \quad (2.83)$$

$$tr(\epsilon)^t \simeq 0.$$

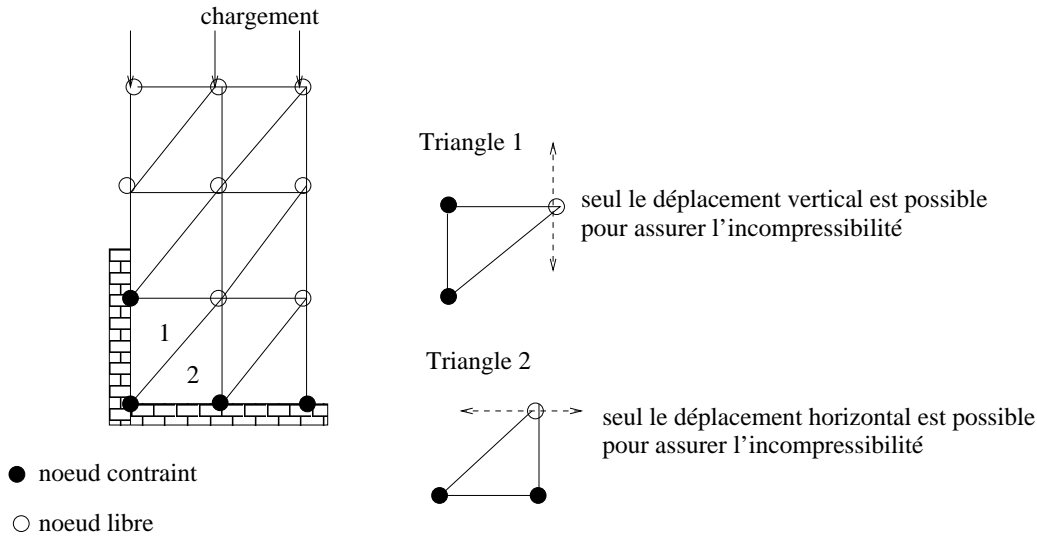


FIG. 2.13 – *Locking (déplacement nul) pour l'élément incompatible P1/P0 [Zienkiewicz et al.89]*

Si on utilise des triangles linéaires avec des pressions constantes par élément (i.e. forme irréductible avec sous-intégration de la pression), la contrainte d'incompressibilité par élément ne peut être respectée. En effet il y a incompatibilité de déplacement du noeud libre commun aux triangles 1 et 2: pour le triangle 1 la contrainte

d'incompressibilité de l'élément impose un déplacement vertical, alors que pour le triangle 2 la contrainte d'incompressibilité impose un déplacement horizontal. Dans ce cas la solution est naturellement un champ de vitesse nul (voire aucune solution). Cette situation est le résultat du *locking* de l'élément $P1/P0$ qui est connu pour être incompatible. Dans le cas d'une méthode mixte en vitesse-pressure, l'incompressibilité sera assurée sur l'ensemble du maillage et permettra de *relâcher* le système pour éviter le phénomène de *locking*. La figure 2.14 illustre cet exemple, le champ de déplacement est correct, la solution ne souffre pas d'effet d'incompatibilité.

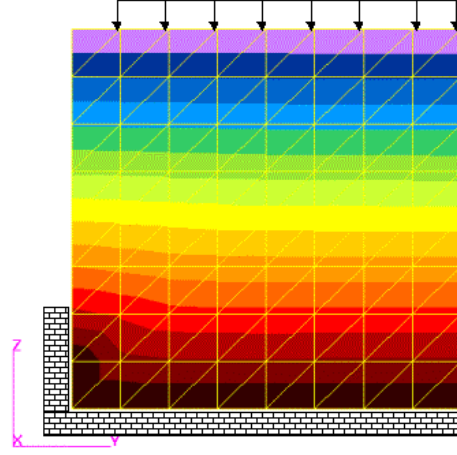


FIG. 2.14 – Non-locking pour l'élément compatible $P1+ / P1$, champ de déplacement selon l'axe z non nul.

En conclusion du patch-test, on soulignera l'intérêt des formulations mixtes en mise en forme, qui permettent d'obtenir plus de précision que les méthodes dites irréductibles (i.e. méthode à un champ). Les méthodes mixtes montrent la possibilité des éléments finis à simuler des situations de plus en plus complexes.

2.3 Convergence élément finis: test numérique

Il est possible d'accéder à la précision de l'élément utilisé en comparant la solution éléments finis, à une solution analytique connue. L'erreur éléments finis associée au champ de vitesse \mathcal{E}_v et de pression \mathcal{E}_p est définie de la manière suivante [Fortin et al.85]:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{v,1} &= \|v - v_h\|_{1,\Omega} \leq Ch^2, & 8 \\ \mathcal{E}_{v,0} &= \|v - v_h\|_{0,\Omega} \leq Ch, \\ \mathcal{E}_p &= \|p - p_h\|_{0,\Omega} \leq Ch. \end{aligned} \tag{2.84}$$

C est une constante indépendante de la discrétisation spatiale h , qui dépend du domaine.

L'erreur totale élément finis est alors, $\mathcal{E} = \mathcal{E}_{v,1} + \mathcal{E}_p \leq Ch$.

où v est la solution en vitesse exacte, p la solution en pression exacte, v_h est la solution en vitesse numérique, et p_h la solution en pression numérique.

$$\begin{aligned} 8. \quad \|x\|_{1,\Omega} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\int_{\Omega} x^2 d\Omega + \int_{\Omega} |\nabla x|^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}}, \\ \|x\|_{0,\Omega} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \left(\int_{\Omega} x^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Dans le cadre de l'élasto-plasticité, il est difficile d'exprimer ces normes, et nous avons utilisé les normes plus naturelles définies de la manière suivante:

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_v &= \|d - d_h\|_{0,\Omega} \leq Ch^2, \\ \mathcal{E}_p &= \left\| \frac{p}{E} - \frac{p_h}{E} \right\|_{0,\Omega} \leq Ch.\end{aligned}\tag{2.85}$$

où d est le déplacement exact, d_h la solution numérique, p la pression exacte, p_h celle obtenue par la solution numérique, et E est le module d'Young qui permet d'adimensionnaliser la pression. Les normes L^2 utilisées donneront une idée sur la convergence du champ de déplacement proche de la vitesse en élasto-plasticité, et également sur la convergence du champ de pression.

Nous reprenons le test utilisé par [Gratacos91] et [Gay95] du tube sous pression interne (*figure 2.15*). On considère un tube infiniment long suivant son axe z , et un comportement incompressible élastoplastique parfait. Le tube est soumis à une pression croissante sur sa paroi interne, et sa paroi externe est libre. Le problème se ramène à un problème mono-dimensionnel suivant le rayon, régit par les équations suivantes:

– axi-symétrie:

$$u = u(r), \epsilon^t = \begin{bmatrix} \frac{du(r)}{dr} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{u}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.\tag{2.86}$$

– incompressibilité

$$tr \epsilon^t = \frac{du(r)}{r} + \frac{u}{r} = 0.\tag{2.87}$$

– équilibre

$$div \sigma = 0\tag{2.88}$$

– conditions aux limites

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}(r_{int}) &= -P_{imp}(t), \\ \sigma_{rr}(r_{ext}) &= 0,\end{aligned}\tag{2.89}$$

Les équations nous permettent d'aboutir aux expressions analytiques du champ de déplacement u , des champs de déviateur et de pression $s_{rr,\theta\theta,zz}$ et p dans les deux zones (éventuelles) du tube élastique et élastoplastique. Soit σ_0 la limite élastique, ρ le rayon de transition entre les deux zones, on obtient:

– dans la zone élastique $r_{int} < r < \rho$:

$$\begin{aligned}
 u(r) &= \frac{1}{2\mu} \frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \rho^2 \frac{1}{r}, \\
 s_{rr}(r) &= -\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \rho^2 \frac{1}{r^2}, \\
 s_{\theta\theta}(r) &= \frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \rho^2 \frac{1}{r^2}, \\
 s_{zz} &= 0, \\
 p(r) &= -\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \rho^2 \frac{1}{r_{ext}^2},
 \end{aligned} \tag{2.90}$$

– dans la zone élastoplastique $\rho < r < r_{ext}$:

$$\begin{aligned}
 u(r) &= \frac{1}{2\mu} \frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \rho^2 \frac{1}{r}, \\
 s_{rr}(r) &= -\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}}, \\
 s_{\theta\theta}(r) &= \frac{\sigma_0}{\sqrt{3}}, \\
 s_{zz} &= 0, \\
 p(r) &= -\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \left[\ln\left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) + \frac{\rho^2}{r_{ext}^2} \right],
 \end{aligned} \tag{2.91}$$

ρ est déterminé analytiquement en résolvant l'équation aux conditions aux limites:

$$\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \left[\ln\left(\frac{r_{int}^2}{\rho^2}\right) + \frac{\rho^2}{r_{ext}^2} - 1 \right] = -P_{imp}. \tag{2.92}$$

– géométrie et caractéristique utilisées:

$$\begin{aligned}
 \sigma_0 &= 500 \text{ MPa}, \\
 E &= 200000 \text{ MPa}, \\
 \nu &= 0.4999, \text{ calcul quasi-incompressible}, \\
 r_{int} &= 100 \text{ mm}, \\
 r_{ext} &= 300 \text{ mm}, \\
 P_{imp} &= 100t \text{ MPa}, \text{ où } t \text{ est le temps},
 \end{aligned} \tag{2.93}$$

– Résultats et discussion:

Les résultats de ce test sont présentés pour une pression interne de 500 MPa, correspondant à un rayon de transition ρ de 170.5 mm. Le calcul est effectué en 5 incréments avec un pas de temps de $\Delta t = 1$ s. La figure 2.16 montre l'évolution du déplacement et de la pression dans la section du tube.

Les erreurs *éléments finis* sont représentées sur les figure 2.17 en fonction de la taille de maille h . L'ordre de convergence est donné par la pente de l'asymptote de la courbe d'erreur tracée en échelle logarithmique. l'ordre de convergence attendu en norme choisie L^2 est respecté. Le taux de convergence de la méthode est de 1.25 pour

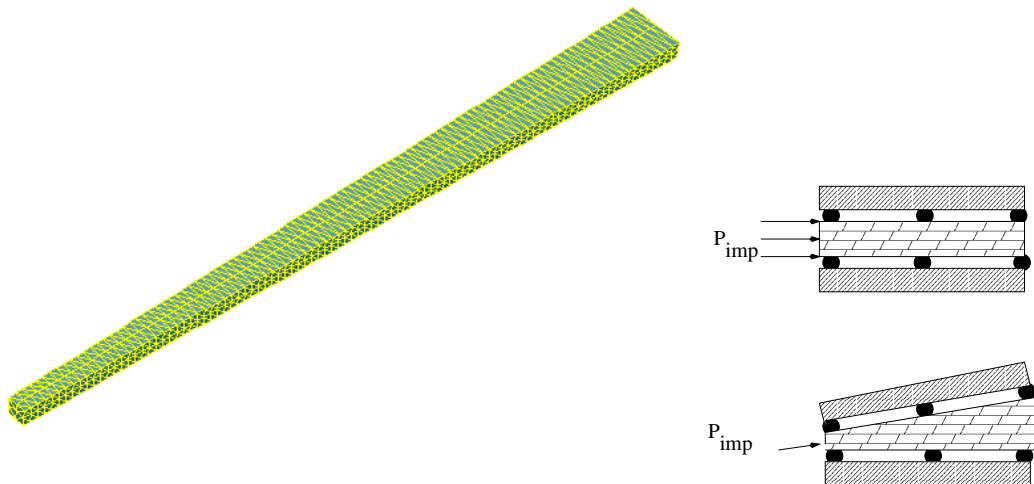


FIG. 2.15 – *Tube sous pression interne: représentation de la géométrie utilisée et des conditions aux limites associées. Maillage structuré; 729 noeuds et 1920 éléments.*

la pression (prévu 1), et de 1.6 pour le déplacement (prévu 2), ce qui est satisfaisant. Ces coefficients ont été obtenus en utilisant un ajustement des courbes par des droites dont les pentes donnent l'ordre de convergence de l'élément. Les écarts par rapport aux valeurs théoriques peuvent s'expliquer par une mauvaise corrélation entre les points simulés et le fittage de la droite théorique. En effet on observe sur la courbe un léger changement de pente pour le dernier point (taille de maille la plus petite) qui a tendance à diminuer la pente de l'erreur sur des vitesses et augmenter la pente de l'erreur sur les pressions. D'autre part peu d'études ont été faites sur les convergences éléments finis du problème de Stokes étendu au calcul élasto-plastique. Il se peut que la résolution de la loi de comportement élasto-plastique des équations de Prandtl-Reuss rajoute une erreur supplémentaire à l'erreur classique habituellement calculée pour des problèmes de Stokes.

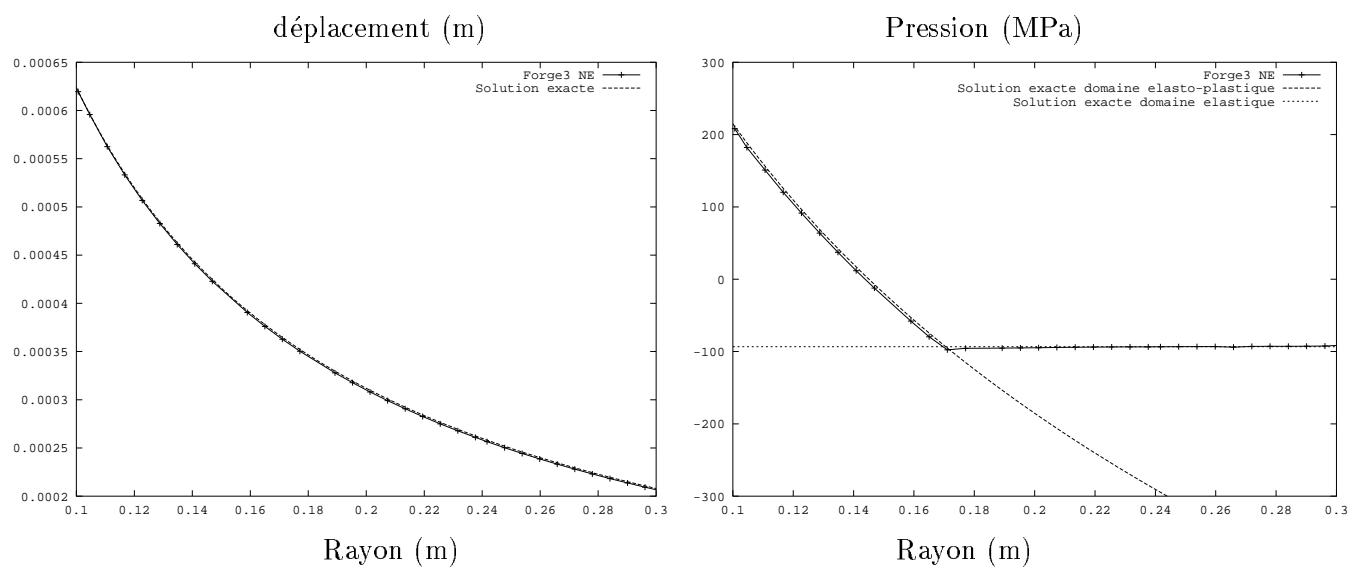
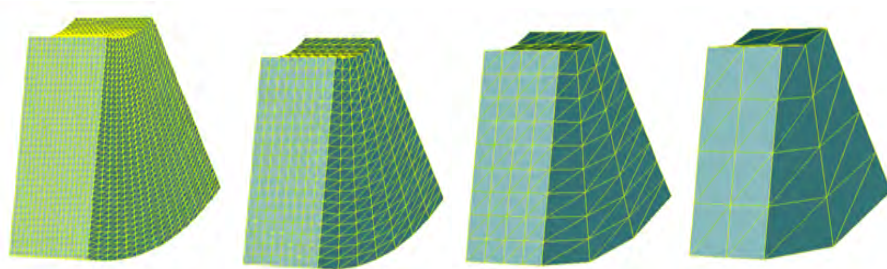
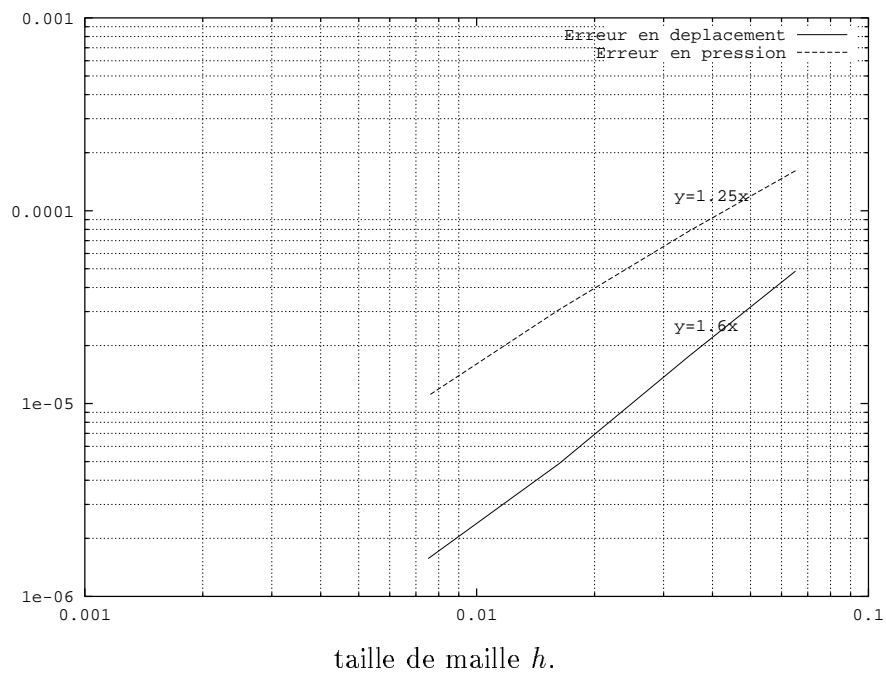


FIG. 2.16 – Déplacement et pression pour le MINI-élément, comparaison avec la solution exacte.



a)
Erreur E.F.



b)

FIG. 2.17 – Évolution de l'erreur E.F. en fonction de la taille de maille h , a) maillages utilisés, b) \mathcal{E}_d , \mathcal{E}_p

2.4 Conclusion

Dans cette partie, nous avons présenté la résolution du problème mécanique. Le problème mécanique se scinde en deux parties: la résolution de la loi de comportement à partir du champ de vitesse donné par le modèle des éléments finis, et la résolution globale de l'équilibre mécanique par la méthode des éléments finis.

- Nous avons montré que l'algorithme du retour radial présenté par [Simo et al.85] pouvait être utilisé dans le cadre de la thermo-élasto-viscoplasticité. Les comparaisons avec le logiciel SiDoLo, qui utilise une résolution fine de type Runge-Kutta, ont montré que notre algorithme permet de rendre compte un écrouissage complexe isotrope et cinématique non-linéaire avec des effets thermiques, d'écrouissages non linéaires mixtes isotropes/cinématiques, et visqueux. L'utilisation d'un module tangent consistant permet de conserver une bonne convergence avec la résolution de Newton-Raphson, même en cas d'utilisation de grands pas de temps. D'autre part, l'algorithme dégénère facilement vers une solution élastoplastique en faisant tendre la consistance visqueuse K vers 0.
- Nous avons montré que le MINI-élément bien adapté aux écoulements visqueux incompressibles [Coupez97] pouvait être généralisé à l'étude des *écoulements* élasto-viscoplastiques. Ceci nous a conduit à exploiter les propriétés particulières du champ *bulle*, pour aboutir à une formulation originale du P1+/P1 que nous appelons MINI-élément. Le test du tube sous pression interne nous a permis de mesurer la précision du MINI-élément, dans une configuration où les déplacements des noeuds sont très contraints. Sur cet exemple on retrouve les résultats de [Gay95] obtenus avec le P1+/P1 intégration complète. Les résultats montrent une très bonne corrélation entre la solution exacte et la solution obtenue par les éléments finis. Nous avons montré que la formulation originale MINI-élément est applicable dans le cadre de l'élasto-plasticité, et qu'elle donne un schéma éléments finis stable.

Cette partie nous permet de tirer deux types de conclusion. D'une part l'utilisation d'un élément compatible (au sens de Brezzi-Babuska) permet d'obtenir des solutions 3D exactes en vitesse et pression, ce qui sera de la première importance dans la résolution du problème mécanique lié au traitement thermique. L'utilisation du MINI-élément rendra la résolution moins coûteuse en temps de calcul par rapport à des éléments finis d'ordre supérieur. De plus l'utilisation des éléments tétraédriques offre une grande souplesse de maillage pour décrire des géométries 3D complexes. Ainsi ces résultats justifient pleinement le choix du MINI-élément pour traiter le problème mécanique élasto-viscoplastique 3D. Avant de rendre compte des résultats dans des géométries 3D, nous allons décrire au chapitre suivant l'algorithme de résolution des transferts thermiques.

Bibliographie

- [Arnold et al.83] Arnold (D.N.), Brezzi (F.) et Fortin (M.). – A stable finite element for the stokes equations. *INT. J. NUM. METH. HeatFluid Flow*, September 1983, pp. 37–50.
- [Arnold et al.84] Arnold (D.N.), Brezzi (F.) et Fortin (M.). – A stable finite element for stokes equations. *Calcolo*, vol. 21, 1984, pp. 337–344.
- [Boyre99] Boyère (E.). – *Contribution à la modélisation numérique thermo-mécanique tridimensionnelle du forgeage*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, juin 1999.
- [Brezzi et al.91] Brezzi (F.) et Fortin (M.). – *Mixed and Hybrid Finite Elements Methods*. – Springer-Verlag, 1991.
- [Chaboche89] Chaboche (J.L.). – Constitutive equations for cyclic plasticity and cyclic viscoplasticity. *Int. J. of Plast.*, vol. 5, 1989, pp. 247–302.
- [Cheik87] Cheik (A. Ben). – *Elastoviscoplasticité à température variable*. – Thèse de doctorat, Université de Paris VI, Juillet 1987.
- [Colonna et al.92] Colonna (F.), Massoni (E.), Denis (S.), Chenot (J-L.), Wendenbaum (J.) et Gauthier (E.). – On thermo-elastic-viscoplastic analysis of cooling processes including phases changes. *Journal of Materials Processing Technology*, n° 34, 1992, pp. 525–532.
- [Colonna92] Colonna (F.). – *Modélisation numérique du refroidissement des rails*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1992.
- [Coupez97] Coupez (T.). – Stable stabilized finite element for 3d forming calculation. – 1997. à paraître.
- [Delobelle et al.84] Delobelle (P.) et Oytana (C.). – Experimental study of the flow rules of a 316 stainless steel at high and low stress. *Nucl. Engng. Design*, vol. 83, 1984, p. 333.
- [Fortin et al.85] Fortin (M.) et Fortin (A.). – Newer end newer elements for incompressible flows. *Finite Element in Fluids*, ed. Oden (J.T.), Wiley and Sons, 1985, pp. 171–187.
- [Gay95] Gay (C.). – *Contribution à la simulation numérique tridimensionnelle du forgeage à froid*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1995.
- [Germain83] Germain (P.). – *Mécanique*. – Ecole Polytechnique, Paris, 1983, ellipses édition volume 1,2.
- [Gratacos91] Gratacos (P.). – *Un problème de déformation couplée: modélisation élastoplastique par éléments finis du laminage à froid de bande mince*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, avril 1991.
- [Hughes84] Hughes (T.J.R.). – *Numerical implementation of constitutive models: rate-independent deviatoric plasticity*. – Martinus Nijhoff, Dordrecht, The Netherlands, 1984.
- [Inoue et al.97] Inoue (T.) et Arimoto (K.). – Development and implementation of CAE system 'hearts' for heat treatment simulation based on metallo-thermo-mechanics. *Journal of Materials Engineering and Performance*, vol. 6, n° 1, February 1997, pp. 51–60.
- [Krieg et al.76] Krieg (R.D.) et Key (S.W.). – Implementation of a time dependant plasticity theory into structural computer programs. *Comp. and Engng. Asp., AMD-20 ASM, New York*, 1976.

-
- [Lematre et al.88] Lemaître (J.) et Chaboche (J.L.). – *Mécanique des matériaux solides*. – 1988, dunod édition.
- [Marie97] Marie (S.). – *Un modèle de parallélisation S.P.M.D pour la simulation numérique de procédés de mise en forme des matériaux*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1997.
- [Menai95] Menai (M.). – *Simulation numérique tridimensionnelle du refroidissement des pièces en fonderie, approche thermomécanique*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1995.
- [Nategaal82] Nategaal (J.C.). – On the implementation of inelastic constitutive equations with special reference to large deformation problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 33, 1982, pp. 469–484.
- [Perchat et al.99] Perchat (E.), Fourment (L.) et Coupez (T.). – Mixed formulations and iterative solver for the parallelisation of a forging simulation software by mesh partitionning. *Euroconference: Parallel and Distributed Computing for Computational Mechanics*, vol. EURO-CMPAR99, March 1999, pp. 247–302.
- [Perchatrs] Perchat (E.). – *Mini-élément et factorisation incomplète pour la parallélisation d'un solveur de Stokes 2D: application au forgeage*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, Thèse en cours.
- [Silvester93] Silvester (A. Wathen D.). – Fast iterative solution of stabilised stokes systems part 1: using simple diagonal preconditioners. *INT. J. FOR NUMERICAL METHODS IN FLUIDS*, vol. 30, n° 3, june 1993, pp. 630–649.
- [Simo et al.85] Simo (J.C) et Taylor (R.L.). – Consistant tangent operators for rate independant elastoplasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 48, 1985, pp. 101–118.
- [Sjtrm85] Sjötröm (S.). – Interactions and constitutive models for calculating quench stresses in steel. *Materials science and technology*, vol. 1, octobre 1985, pp. 823–829.
- [Zienkiewicz et al.89] Zienkiewicz (O.C.) et Taylor (R.L.). – *The finite element method*. – Mc Graw-hill, 1989, 4 édition volume 1.

Chapitre 3

La modélisation du problème thermique instationnaire

Sommaire

3.1	Équation de la chaleur	60
3.2	Les équations de comportement	60
3.3	Méthode Galerkin à un champ	61
3.3.1	Discrétisation spatiale par la méthode des éléments finis	62
3.3.2	Méthodes stabilisées pour la résolution du problème de traitement thermique	64
3.4	Contrôle automatique du pas de temps par minimisation d'erreur:	71
3.4.1	Algorithme de contrôle automatique du pas de temps	72
3.4.2	Application du contrôle automatique du pas de temps sur un calcul de trempe	73
3.5	Méthode mixte température & flux en thermique	77
3.5.1	Formulation variationnelle	77
3.5.2	Discrétisation	77
3.6	Conclusion	90
	Bibliographie	91

3.1 Équation de la chaleur

Dans ce chapitre, on rappelle les équations classiques de la thermique. Nous développerons les modifications que nous avons effectuées nécessaires à l'application de Forge© au traitement thermique. Ce chapitre est composé de quatre parties:

- Résolution classique de l'équation de la chaleur à un champ inconnu du problème. Nous reprenons la formulation Galerkin mise en œuvre par [Soyris90] dans Forge© (version 2D et 3D).
- La résolution par les méthodes de type Galerkin du problème du choc thermique fait apparaître des instabilités numériques. Pour résoudre ces difficultés, on propose d'utiliser des méthodes numériques dites *stabilisantes*, en introduisant une diffusion artificielle au schéma initial de Galerkin.
- On présentera également une approche basée sur une formulation mixte à deux champs température-flux. Cette approche ne nécessite pas de rajouter de la diffusion artificielle, et on verra qu'elle ne souffre pas, dans le cas de trempe sévère, d'oscillations spatiales caractéristiques des méthodes Galerkin classiques à un champ. Par contre cette méthode est explicite et nécessitera l'utilisation de petits pas de temps.
- La dernière partie de ce chapitre sera consacrée à la présentation d'un algorithme de gestion automatique du pas de temps de calcul, dans le but de réduire les coûts de calcul tout en maîtrisant l'erreur commise sur le champ de température.

3.2 Les équations de comportement

Le problème thermique que l'on doit traiter est instationnaire. Il est régi par l'équation de la chaleur, et borné par les conditions aux limites sur les surfaces libres.

En tout point de notre domaine Ω_t , on peut écrire la conservation de l'énergie interne:

$$\rho c \frac{dT}{dt} = -\text{div}(q) + \dot{W} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \rho c & : \text{capacité calorifique} \\ \frac{\partial T}{\partial t} & : \text{dérivée temporelle de T} \\ \vec{q} & : \text{flux de chaleur} \\ \dot{W} & : \text{terme de couplage, source interne de chaleur} \end{cases} \quad (3.1)$$

Nous supposons que le matériau obéit à une loi de conduction isotrope:

$$q = -k \text{grad}(T) \quad \text{avec} \quad k : \text{conductivité du matériau} \quad (3.2)$$

Les conditions aux limites sur $\partial\Omega$ sont de trois types (cf *figure 3.1*):

1. convection et rayonnement sur $\partial\Omega_1$ (celui-ci est négligeable lorsque la pièce baigne dans un liquide). On écrit ce type de conditions aux limites en regroupant les deux modes de transfert:

$$-k \text{grad}(T) \cdot n_{ext} = h(T_s - T_{ext}) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} h & = h_{cv} + h_r \\ h_r & = \epsilon_r \sigma_r (T_s + T_{ext})(T_s^2 + T_{ext}^2) \end{cases} \quad (3.3)$$

- T_{ext}, T_s : température extérieure, température à la surface
- n_{ext} : normale extérieure à la surface

- ϵ_r : émissivité
 - σ_r : constante de Stefan = $5.6696110^{-8} kg.s^{-3}.K^{-4}$
 - h, h_{cv}, h_r : coefficients de transfert global, de convection, de rayonnement
2. La condition aux limites peut être aussi de type Dirichlet avec une température imposée $T = T_{imp}$ sur $\partial\Omega_2$, qui représente une surface régulée.
 3. Ou encore de type Neumann en flux sortant imposé $-kgrad(T).n_{ext} = \phi_{imp}$ sur $\partial\Omega_3$.

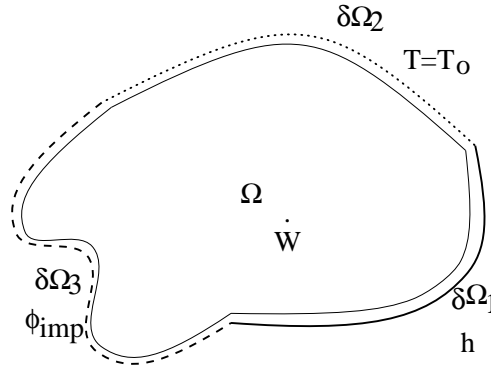


FIG. 3.1 – problème thermique: conditions aux limites

- *remarque*: La détermination du coefficient de transfert h reste difficile; les phénomènes d'échange sont complexes et dépendent de la nature du fluide utilisé (huile, eau,...) et des phénomènes de surface (caléfaction,...). Le coefficient de transfert est également perturbé par le changement de phase en surface qui modifie les propriétés thermophysiques. Dans ce cas, la détermination se fait par méthode inverse [Beck et al.92]: à partir d'un profil thermique expérimental dans la pièce, on résout les équations thermiques jusqu'à obtenir une correspondance entre la simulation et l'expérience.

3.3 Méthode Galerkin à un champ

Sous forme variationnelle, l'équation de la chaleur 3.1 s'exprime par la méthode Galerkin sous la forme suivante:

$$\begin{aligned}
 \forall T^* \quad & \int_{\Omega} \rho c \frac{dT}{dt} T^* d\Omega + \int_{\Omega} k \nabla T \cdot \nabla T^* d\Omega - \int_{\Omega} \dot{W} T^* d\Omega \\
 & + \int_{\partial\Omega_3} \phi_{imp} T^* dS_3 \\
 & + \int_{\partial\Omega_1} h (T - T_{ext}) T^* dS_1 = 0,
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

et

$$T = T_{imp} \text{ sur } \partial\Omega_2. \tag{3.5}$$

3.3.1 Discrétisation spatiale par la méthode des éléments finis

La formulation par éléments finis permet d'écrire à l'instant t la température T en un point quelconque de la pièce (x) sur Ω en fonction des valeurs connues aux noeuds du domaine Ω_h discrétisé:

$$T(x) = \sum_{k=1}^{nbnoe} N_k(x) T_k \quad (3.6)$$

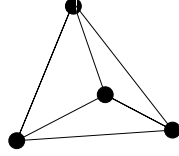


FIG. 3.2 – *Elément tétraédrique à 4 noeuds.*

$N(x) \in P^1$ est la fonction d'interpolation linéaire sur l'élément tétraédrique (figure 3.2). Le problème alors discrétisé se met sous la forme d'un système algébrique à nombre de noeud inconnues T_{noe} (ie ceux dont T n'est pas imposée):

$$[C] \frac{d(T)}{dt} + [K](T) = (Q) \quad (3.7)$$

où (T) désigne le vecteur inconnu composé des valeurs nodales, $[C]$ est la matrice de capacité, $[K]$ la matrice de conductivité et $[Q]$ le vecteur chargement. Nous obtenons la formulation de Galerkin avec les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} C_{ki} &= \sum_{elt} \int_{\Omega_{elt}} \rho c N_k N_i d\Omega \\ K_{ki} &= \sum_{elt} \left[\int_{\Omega_{elt}} k \text{grad}(N_k) \text{grad}(N_i) d\Omega + \int_{\partial\Omega_3} h N_k N_i dS_3 \right] \\ Q_k &= \sum_{elt} \left[\int_{\Omega_{elt}} \dot{W} N_k d\Omega + \int_{\partial\Omega_2} h T_{ext} N_k dS_2 + \int_{\partial\Omega_3} \phi_{imp} N_k dS_3 \right] \end{aligned} \quad (3.8)$$

Le système 3.8 fait apparaître les deux points suivants:

1. la résolution nécessite un schéma d'intégration temporel pour exprimer les dérivées par rapport au temps.
2. le système est nonlinéaire, les matrices $[C]$, $[K]$ et le vecteur (Q) sont thermodépendants (thermodépendance classique et par changement de phase).

3.3.1.1 Différentiation temporelle

On partitionne le temps total du traitement en une série d'intervalles de temps: $\Delta t = t_i - t_{i-1}$. On remarque que le choix de cet intervalle est très important pour la résolution globale du problème du traitement thermique. Ce choix sera discuté au cours du paragraphe § 3.4. Le schéma choisi [Soyris90] est un schéma à trois pas. Le système 3.7 est discrétisé à l'instant t^* , on écrit la température d'un point T^* comme,

$$t^* = \alpha_1 t_{n-1} + \alpha_2 t_n + \alpha_3 t_{n+1} \quad \text{et} \quad T^* = \alpha_1 T_{n-1} + \alpha_2 T_n + \alpha_3 T_{n+1} \quad (3.9)$$

où t_{n-1} , t_n et t_{n+1} sont trois pas de temps successifs séparés par les durées $\Delta t_1 = t_n - t_{n-1}$ et $\Delta t_2 = t_{n+1} - t_n$.

La dérivée de T est également exprimée à l'instant t^* avec un schéma à trois niveaux:

$$\frac{dT^*}{dt} = \frac{\beta_1 T_{n-1} + \beta_2 T_n}{\Delta t_1} + \frac{\gamma_1 T_n + \gamma_2 T_{n+1}}{\Delta t_2}. \quad (3.10)$$

En fait pour que $\frac{dT^*}{dt}$ soit réellement une dérivée temporelle, [Soyris90] a montré qu'il existe une relation entre les coefficients β et γ . Ceci conduit donc à ré-écrire la dérivée de T^* comme:

$$\frac{dT^*}{dt} = (1 - \gamma_2) \frac{T_n - T_{n-1}}{\Delta t_1} + \gamma_2 \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t_2} \quad (3.11)$$

On a maintenant le choix de α_1 , α_2 , α_3 , β_1 , β_2 , γ_1 et γ_2 . Toutefois, on souhaite que le schéma d'intégration temporelle soit inconditionnellement stable et consistant à un ordre le plus élevé possible. Nathalie Soyris [Soyris90] a démontré que le schéma est consistant au second ordre si :

$$\begin{cases} \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1 \\ (\alpha_3 - \frac{1}{2}\gamma_2)\Delta t_2 = \alpha_1\Delta t_1 - \frac{1}{2}(1 - \gamma_2)\Delta t_1 \end{cases} \quad (3.12)$$

ce qui donne :

$$\text{si } \Delta t_1 = \Delta t_2 \begin{cases} \alpha_2 = \frac{3}{2} - 2\alpha_1 - \gamma_2 \\ \alpha_3 = \alpha_1 - \frac{1}{2} + \gamma_2 \end{cases} \quad (3.13)$$

$$\text{et si } \Delta t_1 \neq \Delta t_2 \begin{cases} \alpha_2 = 1 - \alpha_1 + (\frac{1}{2} - \alpha_1)\frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} - \frac{1}{2}\gamma_2(1 + \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}) \\ \alpha_3 = (\alpha_1 - \frac{1}{2})\frac{\Delta t_1}{\Delta t_2} + \frac{1}{2}\gamma_2(1 + \frac{\Delta t_1}{\Delta t_2}) \end{cases} \quad (3.14)$$

Et il est inconditionnellement stable si :

$$\begin{cases} \gamma_2 \geq \frac{1}{2} \\ \alpha_3 > \frac{1}{2}\gamma_2 \end{cases} \quad (3.15)$$

Finalement le système 3.7 se ramène au système différencié en temps 3.17 suivant:

$$[C] \frac{d(T^*)}{dt} + [K](T^*) = (Q), \quad (3.16)$$

soit,

$$[C] \left\{ (1 - \gamma_2) \frac{T_n - T_{n-1}}{\Delta t_1} + \gamma_2 \frac{T_{n+1} - T_n}{\Delta t_2} \right\} + [K] \{ \alpha_1 T_{n-1} + \alpha_2 T_n + \alpha_3 T_{n+1} \} = (Q). \quad (3.17)$$

La consistance à l'ordre 2 de la méthode et la stabilité du schéma imposent nécessairement des relations entre les coefficients α , β et γ (le lecteur intéressé pourra se référer à [Soyris90]).

Nous avons choisi un schéma de Dupont dont le jeu des coefficients est le suivant:

$$\alpha_1 = 0.25 \quad , \quad \alpha_2 = 0 \quad , \quad \alpha_3 = 0.75 \quad , \quad \gamma_2 = 1$$

– remarque

L'initialisation se fait par un schéma de Crank-Nicolson à un pas de temps, dont le jeu des coefficients est:

$$\alpha_1 = 0 \quad , \quad \alpha_2 = 0.5 \quad , \quad \alpha_3 = 0.5 \quad , \quad \gamma_2 = 1$$

3.3.1.2 Linéarisation du problème nonlinéaire

Le système étant nonlinéaire, il peut être résolu par des méthodes itératives de type Newton-Raphson. Ces méthodes sont coûteuses, et la méthode retenue par [Soyris90] est la linéarisation des équations par la formule de Zlamal. Il propose pour toute grandeur G la linéarisation suivante:

$$G^* = C_0 G_{n-1} + C_1 G_n \quad (3.18)$$

Évidemment cette approximation doit rester cohérente avec le schéma temporel adopté,

$$t^* = \alpha_1 t_{n-1} + \alpha_2 t_n + \alpha_3 t_{n+1} = C_0 t_{n-1} + C_1 t_n, \quad (3.19)$$

on arrive donc à l'expression [Soyris90]:

$$G^* = \left(\frac{1}{2} - \frac{\gamma_2}{2} \left(1 + \frac{\Delta t_2}{\Delta t_1}\right)\right) G(t_{n-1}) + \left(\frac{1}{2} + \frac{\gamma_2}{2} \left(1 + \frac{\Delta t_2}{\Delta t_1}\right)\right) G(t_n). \quad (3.20)$$

G^* ainsi définie, consiste à approximer G_{n+1} par la formule,

$$G_{n+1} = G_n + \frac{\Delta t_2}{\Delta t_1} (G_n - G_{n-1}). \quad (3.21)$$

La linéarisation de Zlamal est appliquée aux matrices $[C]$, $[K]$ et au vecteur (Q) du système différencié 3.8. On aboutit in fine au système linéaire:

$$\begin{aligned} [A](T^*) &= (B), \\ A &= f(C_{n-1}, C_n, K_{n+1}, K_n, t_{n-1}, t_n, t_{n+1}, \alpha_i, \gamma_i), \\ B &= g(C_{n-1}, C_n, Q_{n+1}, Q_n, T_{n+1}, T_n, t_{n-1}, t_n, t_{n+1}, \alpha_i, \gamma_i), \end{aligned} \quad (3.22)$$

où le vecteur (T^*) contient les variables nodales inconnues du problème à l'instant t^* . Après résolution, la température à l'instant t_{n+1} est déterminée en inversant l'équation 3.9:

$$T_{n+1} = \frac{1}{\alpha_3} (T^* - \alpha_1 T_{n-1} + \alpha_2 T_n) \quad (3.23)$$

3.3.2 Méthodes stabilisées pour la résolution du problème de traitement thermique

La méthode Galerkin présentée ci-dessus est assez efficace pour des problèmes de chocs thermiques moyens; elle rencontre des difficultés dans le cadre des chocs thermiques forts qui entraînent des oscillations spatio-temporelles du champ de température solution du problème. Ce phénomène est lié à la distance de pénétration h_p , définie comme étant la distance à laquelle l'essentiel du choc thermique est ressenti, et au temps de pénétration de la chaleur t_p via la diffusivité thermique $a = \frac{k}{\rho c}$:

$$t_p = \frac{h_p^2}{4a}. \quad (3.24)$$

Si l'on retranscrit cette notion physique sur une discrétisation éléments finis, la solution du choc thermique ne pourra être représentée correctement que lorsque le gradient thermique pourra être décrit sur l'élément frontière de longueur caractéristique h , c'est à dire quand la profondeur de pénétration dépassera h . Le choc sera ressenti sur cet élément à partir d'un temps caractéristique Δt_c tel que:

$$\Delta t_c = \frac{h^2}{4a} \quad (3.25)$$

Cette relation relie le pas de temps (discrétisation temporelle) et le pas d'espace (discrétisation spatiale). Cette formule a été retrouvée par [Tronel93], qui a démontré que les oscillations thermiques ne sont pas dues à l'intégration temporelle, mais bien liées à la discrétisation spatiale. Ainsi, si la taille de maille h est imposée, le pas de temps stable évitant les oscillations ne devra pas être plus petit que celui défini par 3.25:

$$\Delta t \geq \Delta t_c. \quad (3.26)$$

Prenons l'exemple mono-dimensionnel de la barre infinie. La barre initialement à $800^\circ C$ est soumise à une température de $25^\circ C$ sur un de ses côtés (*cf figure 3.3*). Le calcul est mené en choisissant un pas de temps ne respectant pas la relation de stabilité définie par 3.26. Et comme *traceur* on suit l'évolution de la température en 2 points de la barre. Un premier point situé à 10 mm (premier noeud par rapport à la surface), et un second situé à 20 mm (second noeud par rapport à la surface).

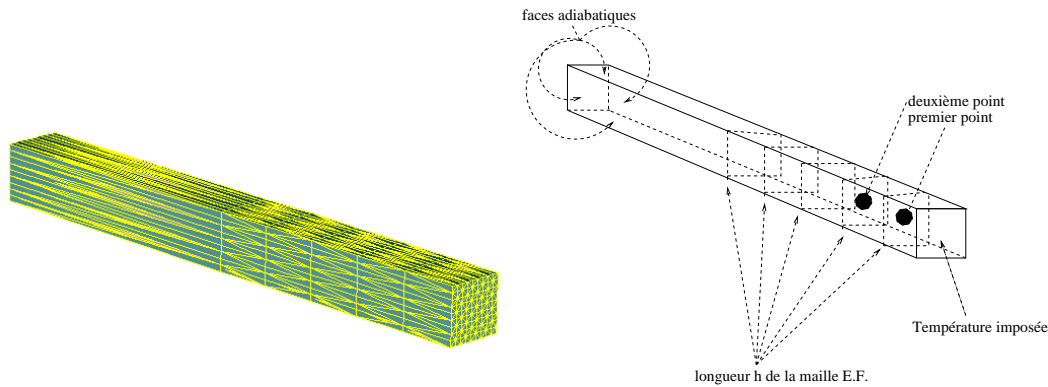


FIG. 3.3 – Barre d'acier soumise à une température imposée constante en peau, $T_0 = 800^\circ C$, $T_{imp} = 25^\circ C$, $k = 15\text{ W/m.K}$, $\rho = 7800\text{ Kg/m}^3$, $c = 360\text{ J/Kg.K}$, taille de maille $h = 0.01\text{ m}$.

Les résultats de ce refroidissement sont représentés sur la *figure 3.4*. Le second noeud est anormalement chauffé et conduit à une évolution thermique non physique de la température.

3.3.2.1 Utilisation de la thermique *asynchrone*

La relation 3.26 définit un pas de temps minimal pour lequel la thermique ne présentera pas d'oscillation du champ de température. Ce pas de temps ne correspond pas forcément au pas de temps désiré (on discutera du choix du pas de temps dans la partie 3.4, on supposera ici qu'il est imposé).

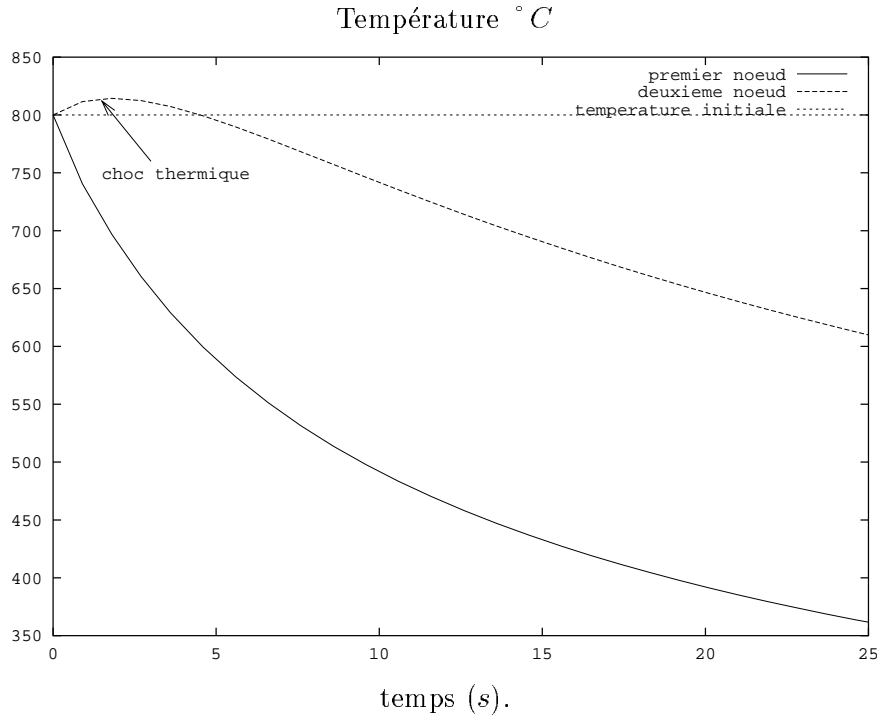


FIG. 3.4 – Représentation du choc thermique en analyse mono-dimensionnelle: échauffement du second noeud.

En effet si le pas de temps désiré Δt ne correspond pas au critère du choc, la température solution T_{n+1} pour Δt est calculée à partir de T_{n+1}^{asyn} avec Δt_c , qui convient au critère du choc, de la manière suivante:

$$T_{n+1} = T_n + (T_{n+1}^{asyn} - T_n) \frac{\Delta t}{\Delta t_c}, \quad (3.27)$$

où T_{n+1}^{asyn} est la solution du problème thermique. Cette relation linéaire est en fait consistante avec le schéma d'intégration, en effet en reprenant 3.10 et remplaçant T_{n+1} par T_{n+1}^{asyn} , on obtient:

$$\frac{dT^{*,asyn}}{dt} = \frac{\beta_1 T_{n-1} + \beta_2 T_n}{\Delta t} + \frac{\gamma_1 T_n + \gamma_2 T_{n+1}^{asyn}}{\Delta t_c} = \frac{\partial T^*}{\partial t} \quad (3.28)$$

Les dérivées étant égales, la thermique asynchrone est assimilée à une linéarisation du problème thermique, le pas de temps asynchrone étant en général important, les températures seront moins bien calculées. La méthode de la thermique asynchrone consiste à utiliser un pas de temps suffisamment grand, de manière à ce que la diffusion créée atteigne la seconde couche de noeuds sous la surface et évite ainsi les oscillations spatiales.

La figure 3.5 illustre l'utilisation de la thermique asynchrone. On remarquera que le calcul du pas de temps asynchrone revient à prendre pour Δt le temps où la courbe de la température du second noeud de la figure 3.4 coupe la droite définie par la température initiale: $\Delta t \simeq 5s$. Ceci illustre bien le fait que la thermique asynchrone a pour rôle de rajouter de la *diffusion* pour stabiliser le choc thermique.

La barre étant considérée comme semi-infinie, dans le cas linéaire, une solution analytique de la température est la suivante:

$$T(x, t) = T_{imp} + (T_0 - T_{imp}) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right), \quad (3.29)$$

dans cette équation x représente la profondeur dans la direction uni-axiale de la barre. La *figure 3.5* représente la solution obtenue en utilisant la méthode asynchrone, donc un pas de temps respectant l'équation 3.25. La solution est différente de la solution analytique, mais ne présente plus de température non physique. Si on utilise un maillage fin $h = 0.0001 \text{ m}$ satisfaisant pour le choc thermique, l'accord parfait entre solution analytique et solution numérique est obtenu (*figure 3.6*).

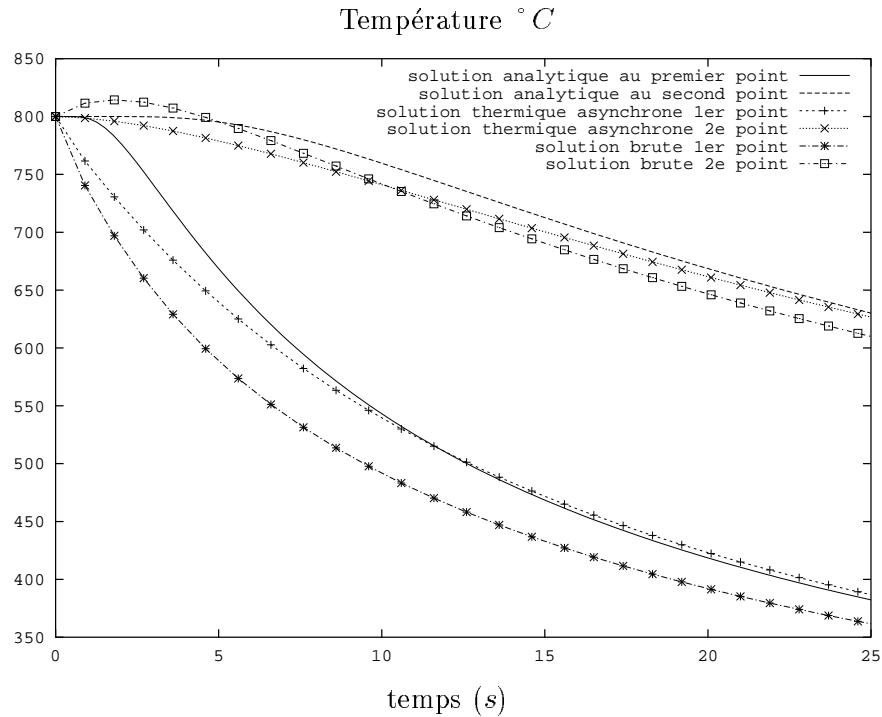


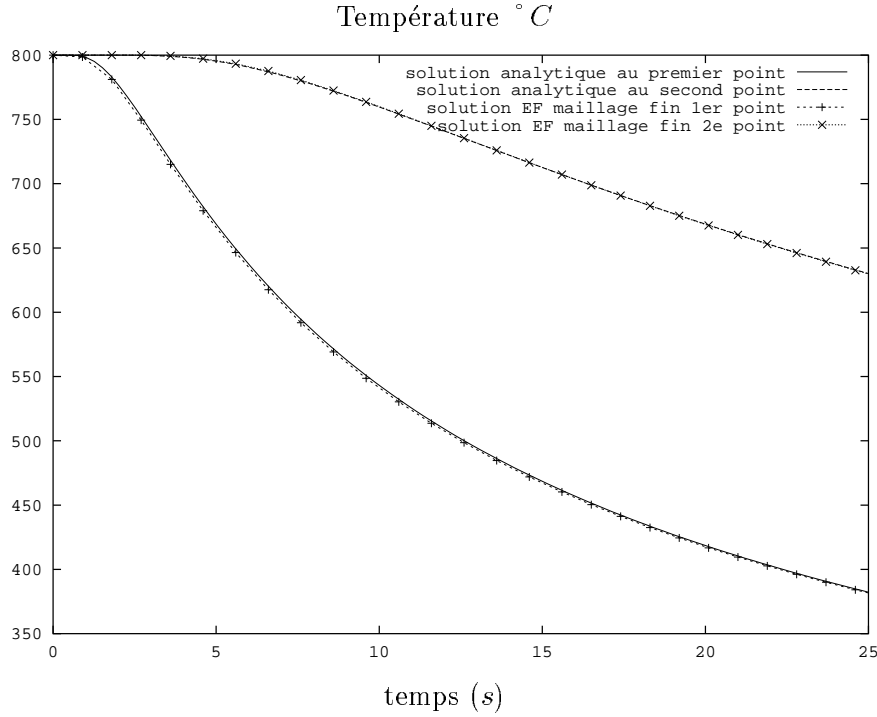
FIG. 3.5 – Représentation de la stabilisation du choc thermique par la thermique asynchrone

3.3.2.2 La thermique *asynchrone* envisageable pour un calcul 3D

– utilisation de la thermique asynchrone

La relation 3.25 est une relation mono-dimensionnelle. L'application en trois dimensions pose le problème de la détermination de h : les éléments sont tétraédriques, le maillage est non structuré, la taille des éléments est hétérogène.

Une mesure objective de h , serait de déterminer h à partir de la taille des arêtes des éléments surfaciques projetées dans le sens du flux thermique. Cela permet de déterminer correctement h de manière à ne pas tenir compte des grandes arêtes qui

FIG. 3.6 – *Comparaison solution analytique et maillage fin.*

sont perpendiculaires au flux thermique (*figure 3.7*).

Une telle mesure de h est très coûteuse. Nous avons choisi une mesure plus rapide qui reste efficace. Le pas de temps Δt_c est calculé de la manière suivante:

$$\Delta t_c = \frac{\sum_{elt \in \partial\Omega} \sum_{noe} (d_{(noe, noe-1)} p)^2 \frac{1}{a(T)}}{nbelt}, \quad (3.30)$$

$$\Delta t_c = MAX(\Delta t_c, \Delta t),$$

$d_{noe, noe-1}$ correspond à la plus grande distance séparant deux noeuds du même élément, p est un poids défini par l'utilisateur et qui permet de prendre en compte l'anisotropie du maillage par rapport au flux thermique. Ce qui revient à prendre la moyenne sur le maillage du rayon de la sphère circonscrite au tétraèdre en tenant compte des variables locales de la diffusivité $a(T)$ thermodépendantes. Évidemment si ce pas de temps est plus petit que celui désiré, alors le pas de temps asynchrone est pris égal au pas de temps voulu.

Pour l'application 3D de la thermique asynchrone, il est intéressant de comparer les résultats calculés entre un maillage structuré et non structuré comme sur la *figure 3.8*.

De la même manière que précédemment, on suit l'évolution thermique des deux traceurs et on regarde l'influence du maillage sur la solution numérique. Pour ces deux maillages, la taille de maille thermique h est identique. Les résultats sur la *figure 3.9* montrent que pour une taille de maille identique, la thermique asynchrone reste stable vis à vis du maillage; en particulier les résultats avec maillage non-structuré (ce qui est le cas en calcul 3D) sont semblables aux résultats obtenus avec un maillage structuré.

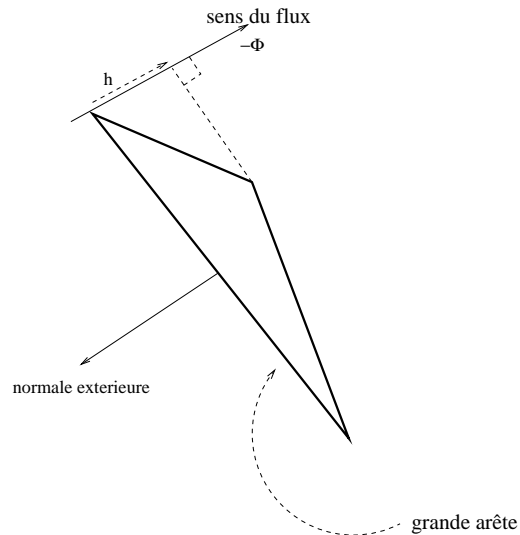
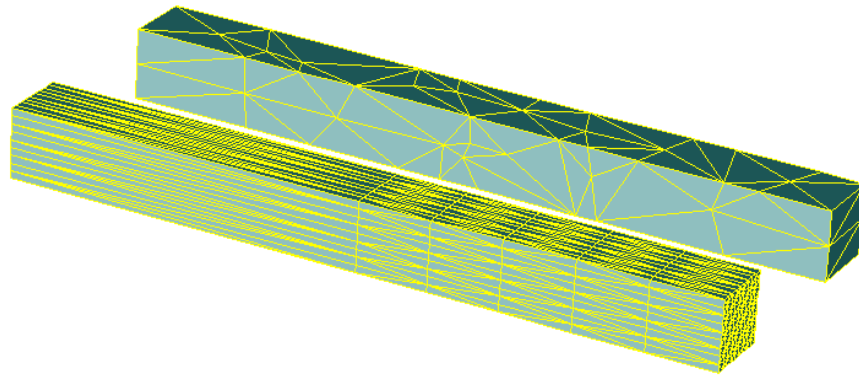
FIG. 3.7 – Représentation 2D d'une mesure objective de la taille de maille thermique h .

FIG. 3.8 – Maillage structuré et non-structuré pour le test de la thermique asynchrone.

– Application 3D de la thermique asynchrone

Sur la *figure 3.10*, on compare la carte de température obtenue avec et sans thermique asynchrone. On reviendra plus en détail sur le calcul du rail dans le chapitre § 7 pour un calcul thermo-mécanique. On voit ici que les oscillations sont gommées par l'utilisation de la thermique asynchrone. Notamment la thermique non asynchrone (à droite sur la *figure 3.10*) présente des points sombres résultant du choc thermique. On notera que le poids utilisé dans ce cas est de $p = 5$ pour tenir compte de l'anisotropie des mailles qui sont au moins 5 fois plus allongées dans le sens perpendiculaire au flux.

- Tout en ne dénaturant pas la solution, la thermique asynchrone permet de faire face aux forts gradients thermiques. La solution obtenue ne présente pas de champ de température non physique, ceci est très important pour le couplage thermo-mécanique; un réchauffement au lieu d'un refroidissement entraîne un profil de contrainte inverse par rapport à la réalité. Toutefois elle a ses limites, et lorsque le choc devient violent, elle peut dénaturer la solution et conduire à un champ de température apparemment correct, mais assez loin de la réalité. La solution est alors d'avoir recourt

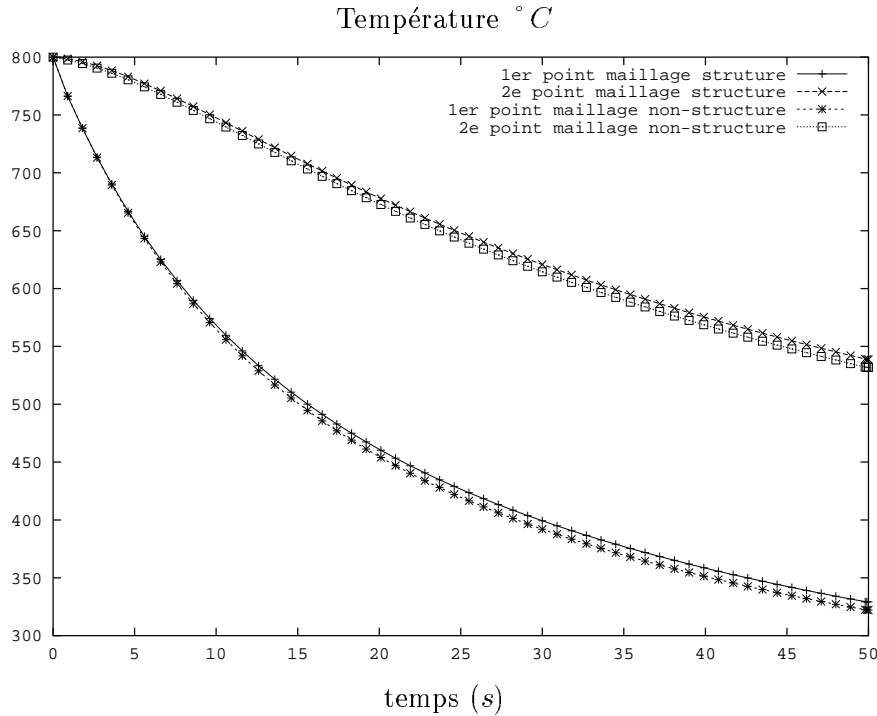


FIG. 3.9 – *Comparaison maillage structuré et non structuré à taille de maille h identique.*

à des techniques numériques plus robustes.

3.3.2.3 Utilisation du solveur des équations paraboliques

Sur la base de l'équation de la chaleur en formulation Galerkin, nous avons implémenté un modèle de cémentation basé sur les équations de Fick généralisées [Leblond et al.83] que nous présentons dans ce chapitre car le problème de la cémentation est numériquement identique au traitement du choc thermique. La cémentation consiste à faire diffuser du carbone dans une pièce initialement homogène en carbone.

$$\frac{dc}{dt} = \text{div}(Ds\vec{\phi}) + \dot{p}, \quad (3.31)$$

$$\vec{\phi} = \text{grad}_s \frac{c}{s},$$

où c est la concentration, s la solubilité du carbone, D le coefficient de diffusion Ds la perméabilité. \dot{p} représente le phénomène de piège que nous n'avons pas pris en compte, ce terme est utilisé dans le cas de la diffusion de l'hydrogène.

Les méthodes numériques pour traiter ces équations sont identiques à celles de l'équation de la chaleur avec la méthode de la diffusion asynchrone pour traiter le problème des chocs. Les conditions aux limites sont:

1. cémentation: concentration imposée à la surface,
2. auto-diffusion: en régime adiabatique.

A titre d'exemple, nous avons simulé la cémentation d'un cylindre. La concentration initiale est de 0.2% en carbone, la concentration imposée en surface est de 0.6% c . Nous

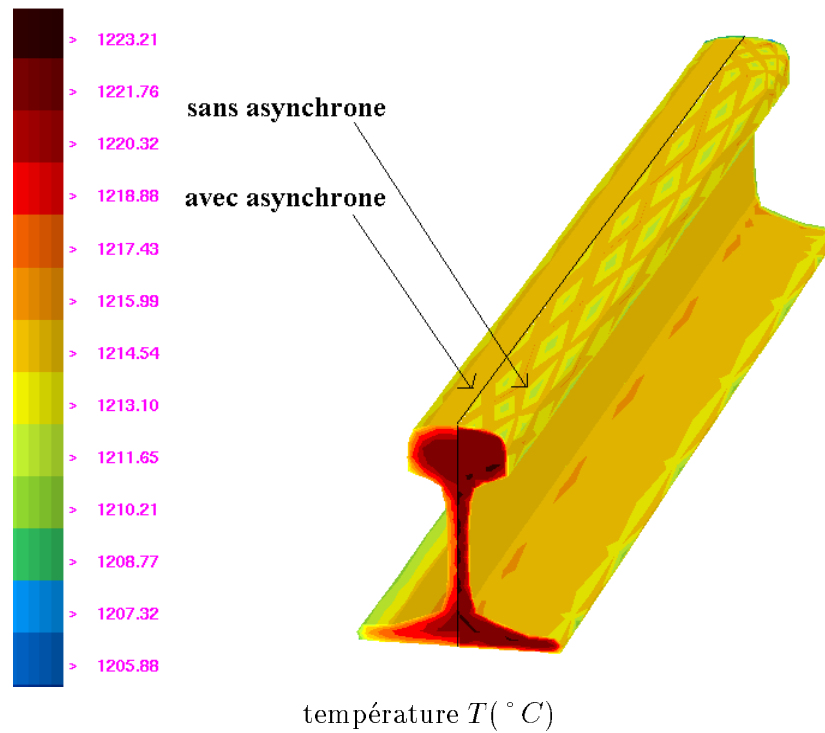


FIG. 3.10 – Comparaison calcul 3D avec thermique asynchrone à droite, et thermique sans asynchrone à gauche, coupe d'un rail. Température en $^{\circ}K$.

comparons la solution élément finis avec la solution analytique momo-dimensionnelle (suivant le rayon du cylindre):

$$c(x, t) = c_{imp} + (c_0 - c_{imp}) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{(Dt)}}\right). \quad (3.32)$$

Le hauteur du cylindre est infinie, et le rayon suffisamment important pour pouvoir traiter le cas en une dimension. On compare les solutions en trois points distants de 0.25, 0.5, et 1.25 mm de la surface. On utilise la méthode de la cémentation asynchrone pour pallier au problème du pas de temps incorrect. Le coefficient de diffusion étant très faible, la taille de maille correcte pour la résolution devient sub-micronique et la méthode asynchrone devient indispensable. Les comparaisons sont présentées sur la *figure 3.11*.

Ce module nous permettra de simuler une étape de cémentation qui précédera la trempe. La cémentation introduit un gradient de carbone en peau de la pièce que nous prendrons en compte dans les calculs thermo-métallurgiques.

3.4 Contrôle automatique du pas de temps par minimisation d'erreur:

La méthode Galerkin standard est implicite, se pose alors le choix du pas de temps. Il faut choisir une valeur caractéristique du procédé simulé qui représente un refroidissement moyen par incrément de calcul de la pièce petit par rapport à l'écart entre la température initiale et finale.

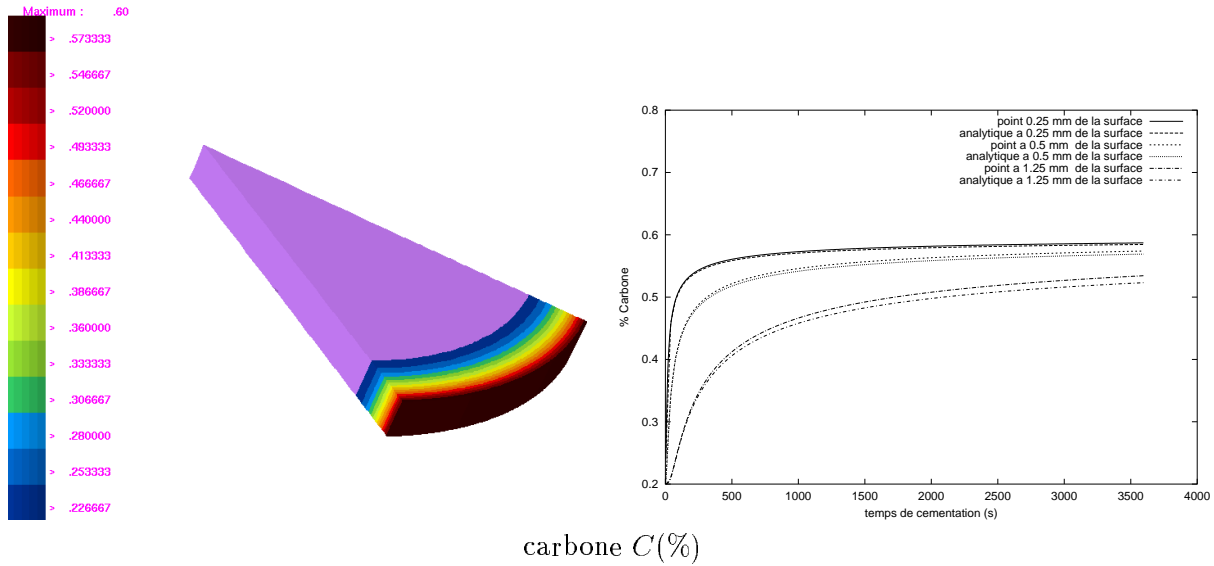


FIG. 3.11 – Comparaison de la solution analytique et E.F avec méthode asynchrone de l'équation de diffusion de Fick.

Le contrôle du pas de temps fait partie d'une étude plus vaste que celle des oscillations thermiques, et qui concerne l'étude d'un estimateur d'erreur a posteriori des problèmes paraboliques non linéaires [Tamma96]. Dans notre cas, une bonne gestion du pas de temps peut s'avérer efficace pour optimiser le temps CPU de la simulation par rapport à un schéma à pas constant. Le schéma de contrôle que nous avons mis en œuvre en 3D, est le suivant: on fixe une borne supérieure pour la variation de température sur l'incrément ΔT_{max} . Cela conduit à adopter d'une part un pas de temps faible lorsque la vitesse de refroidissement est importante ou lorsque la dissipation par changement de phase s'accroît, et d'autre part un pas de temps plus important lorsque les effets thermiques sont faibles (généralement en fin de simulation).

3.4.1 Algorithme de contrôle automatique du pas de temps

L'algorithme est basé sur le principe d'estimateur d'erreur a posteriori pour des problèmes paraboliques (comme l'équation de la chaleur) non linéaires. La stratégie de [Eriksson et al.87] dont s'inspire largement les développements théoriques de [Tamma96], et que nous avons adoptée, est la suivante:

Soit $T_{exact}(t)$ la solution exacte de l'équation de la chaleur, et $T(t)$ sa solution approchée discrétisée. [Eriksson et al.87] montre qu'il est possible d'avoir un estimateur d'erreur entre la solution exacte et approchée:

$$\max_{t \leq t_m} \|T_{exact}(t) - T(t)\| \leq C \left(\ln\left(\frac{t_m}{\Delta t_m}\right) + 1 \right)^{\frac{1}{2}} \max_{n \leq m} (\Delta t_n \|\dot{T}_{exact}(t)\|), \quad (3.33)$$

où C est une constante positive. Dans cette équation le temps t_m est divisé en intervalles de temps $\Delta t_n, n = 1, 2, \dots, m$. Ceci définit une tolérance $\delta > 0$ entre la solution exacte $T_{exact}(t)$ et la solution approchée $T(t)$,

$$\max_{t \leq t_m} \|T_{exact}(t) - T(t)\| \leq \delta. \quad (3.34)$$

En appliquant 3.33, on est amené à choisir un pas de temps Δt_m qui définit la tolérance δ telle que:

$$C' \Delta t_n \|\dot{T}_{exact}(t)\| \simeq \delta. \quad (3.35)$$

Si la solution exacte est connue, on en détermine le pas de temps Δt_m pour une erreur voulue δ . Puisque la solution exacte n'est pas connue, il est raisonnable de remplacer 3.35 par la condition suivante (la validité de cette hypothèse est présentée dans [Eriksson et al.87]):

$$\|T_n - T_{n-1}\| \simeq \frac{\delta}{C'}. \quad (3.36)$$

où C est une autre constante positive. Ainsi si on suppose T_{n-1} calculée avec une intégration numérique sur Δt_{n-1} , le pas suivant Δt_n est choisi de manière à respecter 3.36. δ est défini en fonction de la précision voulue sur les résultats numériques. En pratique on définira $\Delta T_{max} = \frac{\delta}{C'}$ choisit par l'utilisateur. L'estimateur d'erreur est alors :

$$\max_{t \leq t_n} \|T_{exact}(t) - T(t)\| = C' \Delta T_{max}. \quad (3.37)$$

1. on choisit $\Delta t_n = \Delta t_{n-1}$
2. on calcule T_n avec Δt_n
3. si:

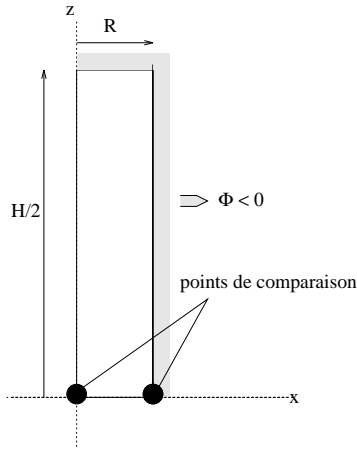
$\frac{1}{q} \Delta T_{max} \leq \|T_n - T_{n-1}\| \simeq q \Delta T_{max}$, $1 < q < 0$, alors le pas de temps Δt_n est accepté et on passe à l'incrément suivant. Sinon il est réduit ou augmenté d'un facteur F, que nous avons choisi de calculer suivant la formule:

$$\Delta t_n = F \Delta t_{n-1} \quad \text{avec} \quad F = \frac{\Delta T_{max}}{\|T_n - T_{n-1}\|},$$

L'erreur est proportionnelle à ΔT_{max} choisi, et sera donc d'autant plus faible qu'on le prendra petit. Typiquement nous avons choisi $\Delta T_{max} = 5^\circ$ pour un refroidissement de 1000° en 50 secondes. Lorsque le pas de temps choisi par le schéma asynchrone s'écarte de cette valeur, il est évident que l'on perd en précision, mais cela répond à un autre impératif, notre choix est de concilier les deux et d'optimiser le pas de temps. Cet algorithme a été utilisé avec succès par [Jaouen98] pour le logiciel Thercast© (logiciel de fonderie), dont la gestion de la résolution thermique est proche de nos préoccupations.

3.4.2 Application du contrôle automatique du pas de temps sur un calcul de trempe

Nous avons effectué un calcul de trempe d'un cylindre *figure 3.4.2* en aluminium de rayon 50 mm (matériau sans changement de phase) pour tester l'influence de la gestion du pas de temps sur l'erreur du champ de température et le temps CPU. Les paramètres de


 FIG. 3.12 – Conditions aux limites de la trempe d'un cylindre $\phi_{imp} = h(T - T_{ext})$.

contrôle du pas de temps sont les suivants:

$$1.8 \leq \|T_n - T_{n-1}\| \leq 2.2, \quad (3.38)$$

ce qui revient à imposer un refroidissement de $\Delta T_{max} = 2^\circ C$ à 10 % près par incrément. Le pas de temps étant borné à 10 s. Le coefficient de transfert thermique imposé (figure 3.13) présente un maximum pour les températures intermédiaires, ceci doit faire évoluer le pas de temps de manière à conserver le refroidissement désiré de $2^\circ C$ (i.e en norme ∞).

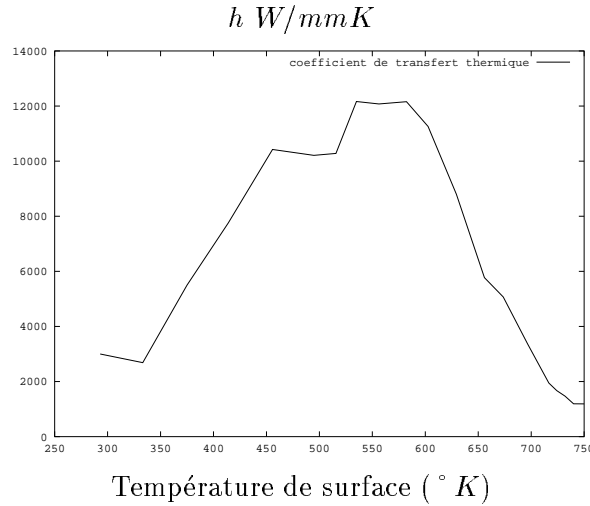


FIG. 3.13 – Variation du coefficient de transfert thermique en fonction de la température de surface.

On compare l'évolution de la température avec un calcul à pas de temps constant $\Delta t = 10^{-2}$. Les températures sont suivies sur deux points caractéristiques, le centre et la peau comme sur la figure 3.4.2. Nous présentons sur la figure 3.14 les températures calculées avec un pas constant et avec un pas variable. Les températures sont très proches.

Le pas de temps a permis d'obtenir une évolution de température correcte pour un moindre coût (essais sur SUN 400 à 250 Mhz):

- CPU en secondes avec pas de temps variable: $3h\ 41mn\ 9s$
- CPU en secondes avec un pas de temps constant: $30h\ 4mn\ 12s$

ce qui représente un gain de temps non négligeable. Le pas de temps est borné lors du couplage thermo-mécanique pour permettre une convergence correcte du solveur mécanique.

L'évolution du pas de temps au cours de la simulation est présenté sur la *figure 3.15*. On remarque que le pas de temps augmente au cours de la simulation pour conserver la consigne de $2\ ^\circ C$ imposée. Une diminution à 0.6 seconde correspond au maximum du coefficient de transfert (*figure 3.13*) lorsque la température de surface atteint $300\ ^\circ C$. Lorsque nous nous intéresserons aux changements de phases, on verra que le pas de temps est également modifié par les vitesses de changements de phases qui modifient fortement par l'intermédiaire des enthalpies de transformation le champ de température.

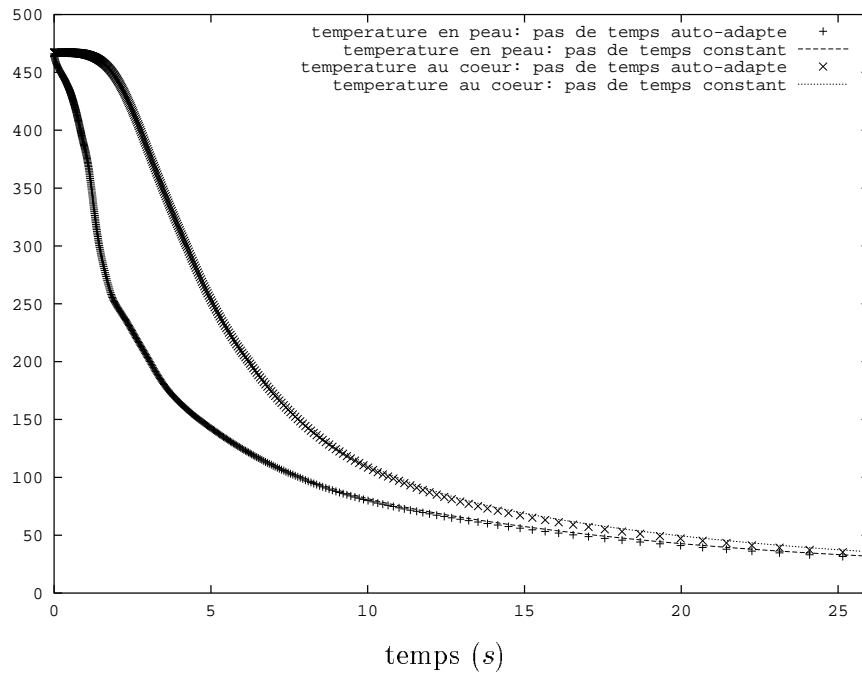


FIG. 3.14 – Comparaison de l'évolution de la température pour un pas de temps constant et un pas de temps auto-adapté, courbes superposées.

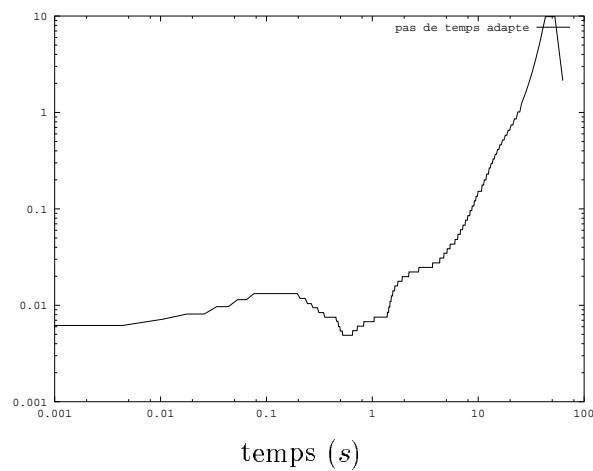


FIG. 3.15 – Variation du pas de temps adapté au cours de la trempe.

3.5 Méthode mixte température & flux en thermique

A partir des équations 3.1 et 3.2, il y a différentes possibilités d'aborder le problème de la discrétisation de l'équation de la chaleur. La méthode de Galerkin déjà présentée substitue l'équation 3.2 dans l'équation 3.1 pour aboutir à une forme irréductible de l'équation de la chaleur. Si on décide de garder les deux équations, on utilise alors une formulation dite *mixte*.

3.5.1 Formulation variationnelle

Sous forme variationnelle les deux équations 3.1 et 3.2 s'expriment en fonction des fonctions tests T^* et q^* :

$$\int_{\Omega} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} T^* dV + \int_{\Omega} T^* \nabla \cdot q dV - \int_{\Omega} T^* \dot{W} dV = 0 \quad (3.39)$$

$$\int_{\Omega} q \cdot q^* dV + \int_{\Omega} k \nabla T \cdot q^* dV = 0 \quad (3.40)$$

A ce stade, la technique des éléments finis mixtes consiste à discrétiser le problème en un nombre d'éléments finis mixtes compatibles. En remarquant que les oscillations spatiales sont dues à l'existence des forts gradients, [Pichelin98] a proposé d'utiliser une formulation mixte originale sans gradient.

3.5.2 Discrétisation

La formulation à deux champs permet d'imposer moins de dérivabilité aux champs inconnus et par conséquent le degré d'interpolation pourra être plus faible qu'une formulation Galerkin à un champ. De ce fait, [Pichelin98][Pichelin et al.98] utilise une interpolation discontinue dite Taylor Galerkin Discontinue, où la température T_h est interpolée par l'ensemble des fonctions discontinues constantes par élément :

$$T_h = \sum_{\Omega_e} T_e, \quad T_h \in P_h, \quad (3.41)$$

l'espace d'approximation P_h est définie par :

$$P_h = (w_h \in L^2(\Omega), w_h|_{\Omega_e} \in P_0(\Omega_e)) \quad (3.42)$$

T_e est la valeur moyenne de la température sur l'élément Ω_e . De la même manière, les auteurs choisissent d'interpoler le flux q par des fonctions q_h constantes par élément : $q_h \in (P_h)^3$. Ce choix délibéré n'est pas une contrainte due à la compatibilité de l'élément. Il suffit en fait de choisir q_h tel que $\text{div } q_h$ soit constante par élément.

– Calcul du flux de chaleur

Le point clef du problème Taylor Galerkin Discontinu, est la définition de ∇T non défini au sens fort sur Ω puisque T y est discontinue. En fait T ou plutôt sa projection T_h , est dérivable au sens des distributions et au sens faible sur Ω de la manière

suivante [Pichelin et al.98]:

On choisit l'ensemble des fonctions $q^* \in D(\Omega)^1$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} q \cdot q^* d\Omega &= - \int_{\Omega} k \nabla T \cdot q^* d\Omega, \\ &= \int_{\Omega} k T \operatorname{div} q^* d\Omega, \end{aligned} \quad (3.43)$$

La formulation faible discrétisée fait intervenir la température approchée T_h qui est constante par élément T_{Ω_e} , et le flux approché q_h qui est également constant par élément q_{Ω_e} :

$$\begin{aligned} \sum_{\Omega_e} \int_{\Omega_e} q_{\Omega_e} \cdot q^* d\Omega &= \sum_{\Omega_e} k \int_{\partial\Omega_e} T_{\Omega_e} q^* \cdot n d\Gamma, \\ &= \sum_{\Omega_e} k T_{\Omega_e} \sum_{F \in \partial\Omega_e} \int_F q^* \cdot n d\Gamma, \\ &= \sum_F \sum_{\Omega_e \in F} \int_F k T_{\Omega_e} q^* \cdot n_{\Omega_e}^F d\Gamma, \\ &= \sum_F k [T_{\Omega_e}] \int_F q^* \cdot n_{\Omega_e}^F d\Gamma, \end{aligned} \quad (3.44)$$

où F_{Ω_e} est une face d'un élément Ω_e , $n_{\Omega_e}^F$ sa normale extérieure à l'élément, et $[T_{\Omega_e}]$ le saut de la température T_{Ω_e} à travers la face F . Ces expressions définissent la notion du gradient d'une interpolation P_0 . On obtient ainsi l'opérateur noté ∇_h , appelé *gradient discret* [Coupez et al.97], défini de P_h dans $(P_h)^3$:

$$\nabla_h w_h = \frac{1}{\|\Omega_e\|} \left(\sum_{F \in \partial\Omega_e} \alpha^F [w_h] \|F\| n_{\Omega_e}^F \right), \quad (3.45)$$

où $\|\Omega_e\|$ est le volume de Ω_e , $[w_h]$ désigne le saut de w_h à travers la face F de surface $\|F\|$ suivant la normale $n_{\Omega_e}^F$, la normale à la face orientée extérieurement à l'élément Ω_e (figure 3.5.2),

$$[w_h] = \sum_{\Omega_{e1} \subset H(F)} w_h|_{\Omega_{e1}} n_{\Omega_{e1}}^F n_{\Omega_e}^F, \quad (3.46)$$

$H(F)$ est l'ensemble des Ω_{e1} qui partagent la face F .

Les poids α^F sont tels que $\sum_{\Omega_{e1} \subset H(F)} \alpha^F = 1$. Ils valent 1 pour les faces frontières, et 0.5 pour les faces internes. En utilisant la notion de gradient discret, la méthode Galerkin Discontinue consiste à résoudre sur chaque élément l'équation suivante:

1. Le lecteur intéressé pourra se référer à [Roddier91] pour une description détaillée de l'espace vectoriel des distributions $D(\Omega)$.

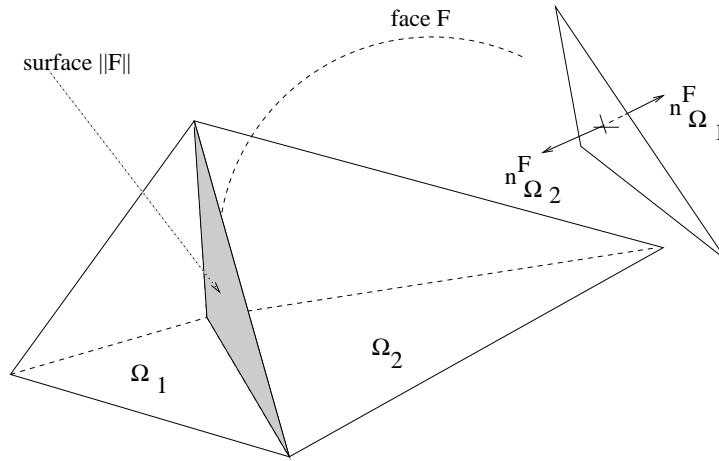


FIG. 3.16 – Calcul du saut à l'interface de deux éléments.

$$q_h = -k \nabla_h T_h, \quad \forall \Omega_e. \quad (3.47)$$

Si la condition aux limites est de type Fourier en flux imposé, la température extérieure n'est pas définie. Dans ce cas le calcul du flux est le suivant en imposant le flux donné ϕ_{imp} :

$$q_h = -\frac{1}{\|\Omega_e\|} \left(\sum_{F \in \partial\Omega_e} k \alpha^F [T_h] \|F\| n_{\Omega_e}^F \right) + \phi_{imp} n_{\Omega_e}^{F'} \quad (3.48)$$

où F est une face interne à Ω_e et $n_{\Omega_e}^{F'}$ une normale débouchant sur la surface libre de Ω_e .

Dans le cas d'une condition limite en convection avec un coefficient de transfert imposé, la température de surface T_s pour déterminer le flux $h(T_s - T_{ext})$ n'est pas définie par cette méthode qui ne peut donner que la température au centre de l'élément (approximation $P0$). Elle peut cependant être estimée en utilisant le flux calculé et la distance entre le centre de l'élément et la surface:

$$T_s = T_h - \frac{q_h \cdot n_{\Omega_e}^F \|\Omega_e\|}{k \|F\|}, \quad (3.49)$$

ce qui montre une des limitations de cette méthode. Toutefois on verra que sur un cas réel, cette approximation est correcte.

Par contre si la condition aux limites est de type Neumann en température imposée, le flux se calcule naturellement en introduisant dans le saut de la température la température imposée. Cela revient à imaginer un élément externe fictif qui aurait la température imposée. Cette méthode est très intéressante dans le cas de calcul multi-domaines, le saut de température entre les domaines se calcule naturellement même en cas de contact parfait.

Le calcul du flux se fait directement puisque c'est une équation locale, sans résolution de système linéaire.

– **Calcul de la température**

De la même manière que l'on a défini un gradient discret, on définit une divergence discrète définie de $(P_h)^3$ dans P_h :

$$\nabla_h \cdot w_h = -\frac{1}{\|\Omega_e\|} \left(\sum_{F \in \partial\Omega_e} \alpha_k^F[w_h] \cdot n_{\Omega_e}^F \|F\| \right), \quad (3.50)$$

Les notations étant identiques. La méthode Galerkin discontinue permet de calculer le terme de la divergence comme:

$$\text{div}(q_h) = -\nabla_h \cdot q_h \quad (3.51)$$

La variation de la température sur chaque élément est calculée directement, où sur chaque élément on doit résoudre l'équation suivante:

$$\rho c \frac{dT_h}{dt} = -\nabla_h \cdot q_h + \dot{W}_h, \quad (3.52)$$

Comme précédemment, dans le cas d'une condition aux limites de type Fourier en flux imposé, le saut du flux se calcule en imaginant un élément fictif à la frontière dont le flux est le flux imposé. Si la condition est de type Neumann le flux extérieur n'est pas défini, on adopte alors la continuité du flux à l'interface. Notons que cette condition n'est pas rencontrée pour la simulation des traitements thermiques, mais dans le cas où une seule température est imposée sur un ensemble de face, la solution de continuité du flux revient à calculer un saut de flux nul à l'interface. La situation est plus complexe si on doit faire respecter la continuité du flux sur un élément dont plusieurs faces sont contraintes en températures imposées différentes.

la dernière étape consiste à définir un schéma de discrétisation temporelle.

– **Schéma de discrétisation temporelle: résolution explicite**

En dérivant successivement les équations du problème continu 3.1 et 3.2, on obtient des nouveaux systèmes dont les inconnues sont les dérivées en temps d'ordre supérieur du champ de température et du flux de chaleur:

$$\rho c \frac{d^{n+1}T}{dt^{n+1}} = -\text{div}\left(\frac{d^n q}{dt^n}\right) + \dot{W} \delta_{0n}, \quad (3.53)$$

$$\frac{d^n \vec{q}}{dt^n} = -k \nabla \left(\frac{d^n T}{dt^n} \right), \quad (3.54)$$

$$\forall n \geq 1,$$

Dans l'équation 3.53 on suppose que \dot{W} est constant sur l'intervalle $t + \Delta t$. Cette hypothèse suppose que ce terme évolue moins rapidement que les autres termes de l'équation.

Pour tous les ordres de dérivation temporelle on conserve l'interpolation constante par élément. Ainsi les équations 3.53 et 3.54 sont discrétisées par la méthode Galerkin Discontinue, dont les inconnues sont les dérivées d'ordre supérieur de la température et du flux:

pour tout Ω_e ,

$$\frac{d^n \vec{q}_h}{dt^n} = -k \nabla_h \frac{d^n T_h}{dt^n}, \quad (3.55)$$

$$\rho c \frac{d^{n+1} T_h}{dt^{n+1}} = -\nabla_h \cdot \frac{d^n \vec{q}_h}{dt^n} + \dot{W}_h \delta_{0n}, \quad (3.56)$$

$$\forall n \geq 1.$$

Connaissant le champ de température à l'instant t , on utilise un développement de Taylor explicite de haut degré pour déterminer le champ de température à l'instant $t + \Delta t$:

$$T(x, t + \Delta t) = T(x, t) + \Delta t \frac{dT}{dt}(x, t) + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^n T}{dt^n}(x, t) + O(\Delta t^{n+1}). \quad (3.57)$$

où le pas de temps Δt doit satisfaire l'équation de stabilité du schéma suivant:

$$\Delta t \leq \left[(p+1)! \epsilon \text{MIN}_{\Omega_e} \left(\left| \frac{d^{p+1} T}{dt^{p+1}} \right|^{-1} \right) \right]^{\frac{1}{p+1}}, \quad (3.58)$$

ϵ est une erreur donnée, qui joue le rôle d'un estimateur d'erreur a priori. Ainsi le schéma explicite est inconditionnellement stable.

En d'autres termes et en utilisant les expressions des dérivées successives, et dans le cas purement diffusif, la méthode explicite reste stable lorsque le pas de temps vérifie la condition suivante:

$$\Delta t \leq \frac{k h^2}{\rho c}, \quad (3.59)$$

Ceci assure que le flux de la température ne traverse pas plus d'un élément sur l'intervalle de temps Δt . On notera que pour des grosses pièces où la taille de maille h est importante, le pas de temps pourra être plus grand, la méthode deviendra alors compétitive par rapport à la thermique Galerkin avec calcul asynchrone.

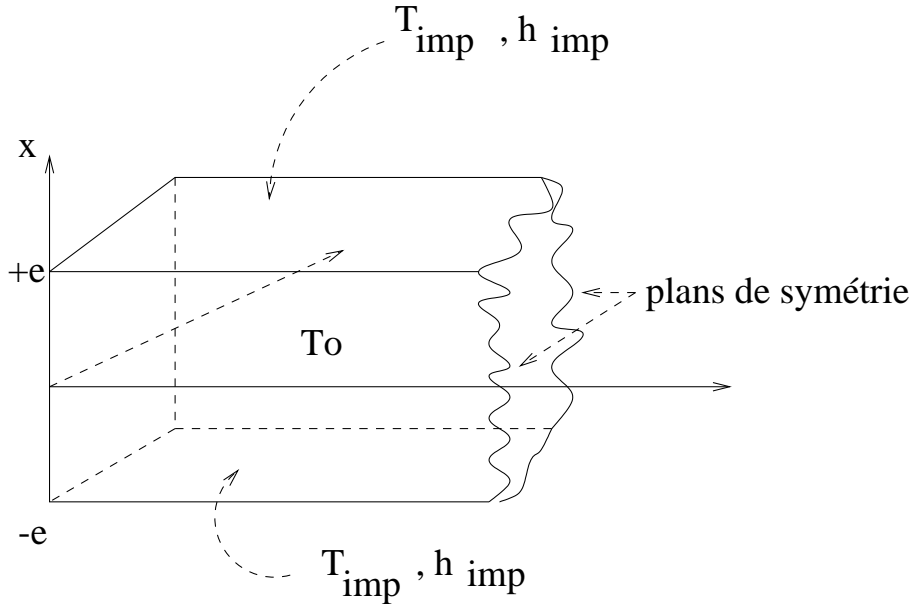
Pour résumer, le schéma de *Taylor Galerkin Discontinu* s'effectue suivant l'algorithme présenté dans le *tableau 3.1*.

initialisation,
T_h données
$n \leftarrow 1$
pour tout Ω_e faire,
$\vec{q}_h = -k \nabla_h T_h, \quad \forall \Omega_e$
$\rho c \frac{dT_h}{dt} = -\nabla_h \cdot \vec{q}_h + \dot{w}_h$
répéter,
pour tout Ω_e faire,
$\frac{d^n \vec{q}_h}{dt^n} = -k \nabla_h \frac{d^n T_h}{dt^n} \quad \rho c \frac{d^{n+1} T_h}{dt^{n+1}} = -\nabla_h \cdot \frac{d^n \vec{q}_h}{dt^n} + \dot{w}_h \delta_{0n} \quad \Delta t \leq \left[(p+1)! \epsilon \text{MIN}_{\Omega_e} \left(\left \frac{d^{p+1} T}{dt^{p+1}} \right ^{-1} \right) \right]^{\frac{1}{p+1}}$
$\forall d \geq 1,$
jusqu'à $d = n+1$
pour tout Ω_e faire,
$T(x, t + \Delta t) = T(x, t) + \Delta t \frac{dT}{dt}(x, t) + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{d^n T}{dt^n}(x, t)$
fin calcul, incrément suivant.

 TAB. 3.1 – *Algorithme de résolution Taylor Galerkin Discontinu*

– Convergence élément fini de la méthode

Nous testons ici la convergence élément fini de la méthode Taylor Galerkin Discontinue. Nous confrontons les résultats de cette méthode avec deux calculs analytiques de la plaque infinie soumise à un choc thermique sur ses parois inférieure et supérieure (cf *figure 3.17*).


 FIG. 3.17 – *Refroidissement d'une plaque infinie.*

La plaque a une épaisseur de $2e$ et est de grandes dimensions latérales, initialement à la température homogène T_0 . A l'instant $t = 0$, on porte les parois de la plaque à la température T_p et on les maintient par la suite à cette température. Le problème

de refroidissement est alors mono-dimensionnel, dont la résolution peut être obtenue sous la forme d'une série [Carslaw et al.59]:

$$T(x, t) = T_p + (T_0 - T_p) 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n + \frac{1}{2})\pi} \exp[-(n + \frac{1}{2})\pi^2 \frac{at}{e^2}] \cos[(n + \frac{1}{2})\frac{\pi x}{e}], \quad (3.60)$$

de la même manière, si on impose une condition limite en flux imposé, toujours sur les mêmes parois, la solution analytique s'écrit sous la forme d'une série [Carslaw et al.59]:

$$T(x, t) = T_p + (T_0 - T_p) 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4 \sin M_n}{(2M_n + \sin(2M_n))} \exp[-M_n^2 \frac{at}{e^2}] \cos[\frac{M_n x}{e}], \quad (3.61)$$

où M_n est la $n^{ème}$ racine positive de l'équation: $M_n \tan(M_n) = \frac{h^T e}{k}$. Le flux valant $\phi_{imp} = h^T (T_s - T_{ext}, T_{ext} = 25^\circ C$

A partir de ces deux solutions analytiques, on peut faire un test de la méthode Taylor Galerkin Discontinue. L'erreur mesurée entre la solution numérique et élément fini est la suivante [Coupez et al.97]:

$$\mathcal{E}_T = \|T - T_h\|_{0,\Omega} \leq Ch. \quad (3.62)$$

C est une constante indépendante de h , qui dépend, pour simplifier, du domaine.

La *figure 3.18* montre la convergence élément fini de la méthode. On voit que la convergence est d'ordre 1 comme prévue par [Coupez et al.97]. Ceci montre tout l'intérêt d'une formulation mixte; le degré d'interpolation peut être d'un ordre inférieur à une formulation standard Galerkin avec la même erreur élément fini.

- utilisation de la méthode Taylor Galerkin discontinue

Reprenons les calculs tests présentés dans le § 3.3.2.1. La *figure 3.19* représente, en comparaison avec la solution mono-dimensionnelle (équation 3.29) analytique, l'évolution de la température dans le cas d'un maillage fin. La solution E.F s'écarte légèrement de la solution analytique. Cet écart est sûrement dû au lissage au noeud effectué après calcul de la méthode Taylor Galerkin discontinue. Le lissage utilisé est la pondération volumique des éléments voisins, ce qui crée une erreur non négligeable lorsque les gradients sont importants. [Pichelin98] a proposé une évaluation aux noeuds du maillage plus précise; l'interpolation par noeud est obtenue à partir de l'interpolation par élément par la recherche du minimum L_2 de $\|\bar{T}_h - T_h\|_0$, où \bar{T}_h est l'interpolée aux noeuds de la température T_h par éléments.

Même dans le cas d'un maillage *grossier*, représenté sur la *figure 3.3*, la *figure 3.20* montre que la méthode Taylor Galerkin discontinue permet d'absorber naturellement le choc thermique, sans technique de stabilisation, comme la méthode Galerkin

1. $\|x\|_{0,\Omega} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} x^2 d\Omega$.

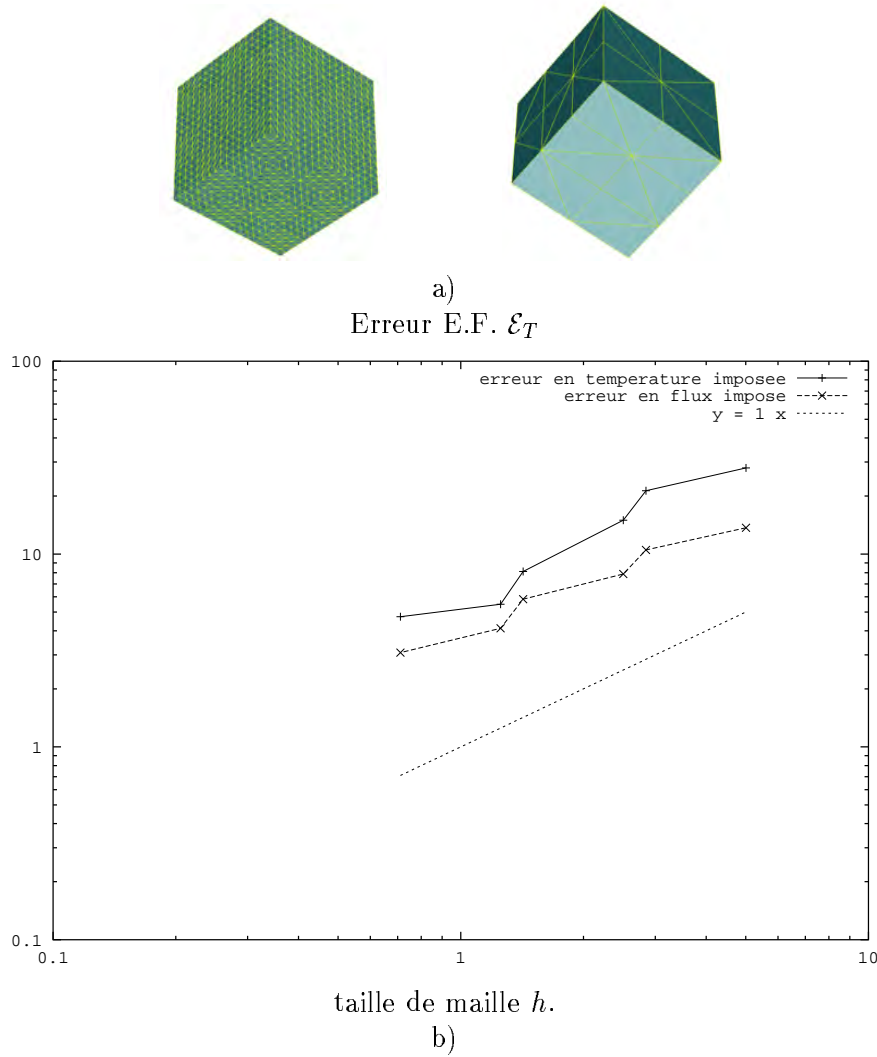


FIG. 3.18 – Évolution de l'erreur E.F. de la méthode Taylor Galerkin discontinue en fonction de la taille de maille h , a) exemple de maillages utilisés, b) \mathcal{E}_T .

associée à la thermique asynchrone. On notera que l'erreur par rapport à la solution analytique est plus importante avec la méthode Taylor Galerkin discontinue, ceci est imputable au faible degré d'interpolation des inconnues. La méthode est d'ordre 1 avec une erreur importante pour les maillages grossiers.

– application 3D de la méthode Taylor Galerkin discontinue

1. Sur la *figure 3.21*, on a représenté un calcul de refroidissement (début du choc thermique) du rail déjà présenté. On compare la méthode standard Galerkin avec la technique asynchrone et la thermique Taylor Galerkin discontinue. Les deux méthodes ne présentent pas d'oscillation thermique puisque toutes les températures sont inférieures à la température initiale de $1223^\circ K$, par contre la méthode asynchrone qui introduit une diffusion artificielle présente des températures plus faibles que la thermique Taylor Galerkin discontinue.
2. Prenons un autre exemple plus sévère; le refroidissement d'une pièce très mas-

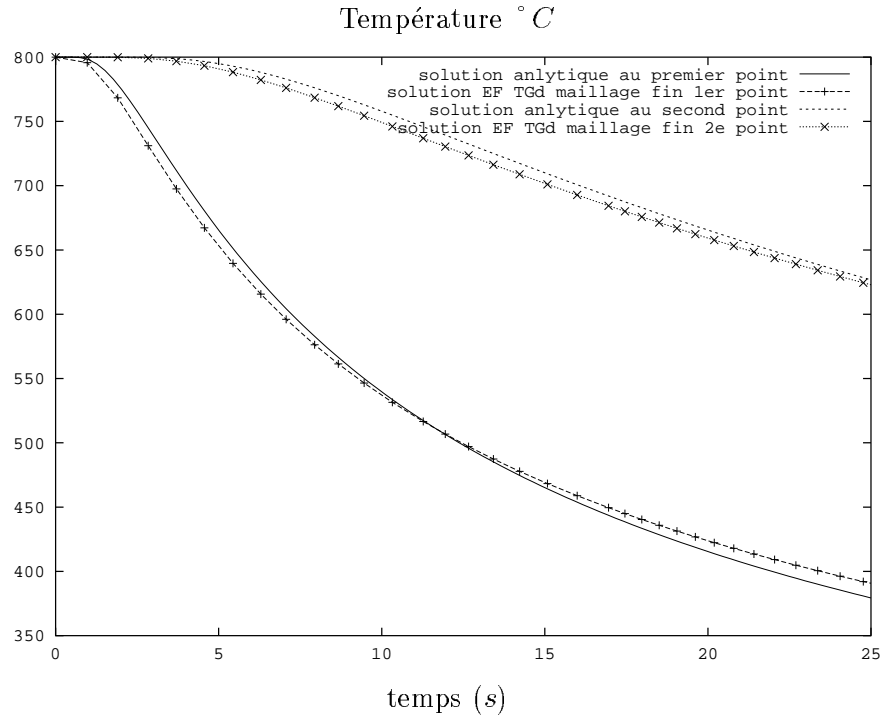


FIG. 3.19 – Comparaison solution analytique et maillage fin avec la méthode Taylor Galerkin discontinue. Température en °K.

sive dont il est difficile de résoudre correctement un choc thermique. La *figure 3.22* montre le maillage utilisé, on atteint déjà 100 000 éléments, alors qu'il faudrait une taille de maille 50 fois plus petite pour résoudre correctement la thermique. Un calcul Galerkin standard conduit à un choc thermique important puisque la température de début est de 1138 °K, et on observe sur la *figure 3.22* une température de 1158 °C. Le choc va dégénérer et conduire à un champ de température complètement faux (on imagine aisément les conséquences sur le profil des contraintes...).

Le pas de temps asynchrone est 150 fois plus grand que le pas de temps réel pour un refroidissement maximal de 10 °C par incrément de calcul. Les résultats obtenus avec les deux méthodes, asynchrone et Taylor Galerkin discontinue, sont montrés sur la *figure 3.23*. Le calcul avec la thermique asynchrone présente quelques points de choc thermique. Par contre, en introduisant une diffusion artificielle, les *iso-couleurs* obtenues avec la thermique asynchrone sont moins chahutés que celle obtenues par la méthode de Taylor Galerkin discontinue. De plus avec la méthode Taylor Galerkin discontinue, la température obtenue est celle au centre de l'élément, et selon la profondeur de la maille en surface, on peut avoir des écarts de température importants sur la surface de la pièce là où la température devrait être presque uniforme.

Nous avons présenté deux méthodes permettant de résoudre l'équation de la chaleur dans des conditions de choc thermique; la thermique Galerkin associée à la méthode asynchrone, la thermique Taylor Galerkin discontinue. Ces deux méthodes permettent d'éviter l'écueil des chocs thermiques. La méthode à deux champs Taylor Galerkin discontinue s'avère concluante, à la réserve près qu'elle ne permet pas d'employer de grand pas de

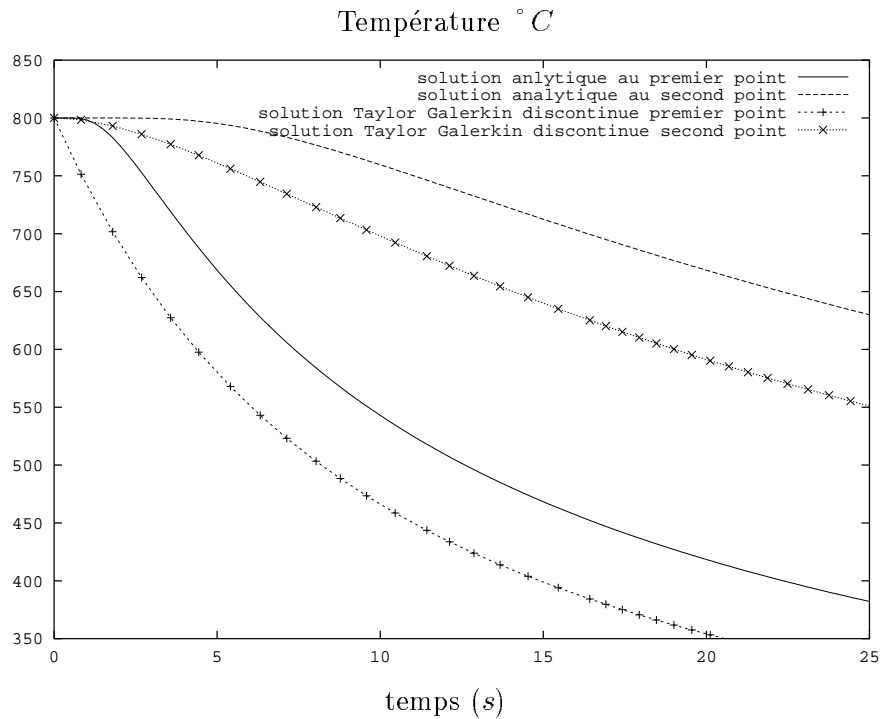


FIG. 3.20 – Comparaison solution analytique et maillage grossier avec la méthode Taylor Galerkin discontinue.

temps en raison de son caractère explicite. La thermique asynchrone est également satisfaisante si le choc thermique n'est pas trop grand. En conclusion, des développements futurs sur le développement d'une méthode mixte implicite permettrait d'absorber les chocs thermiques et d'utiliser de plus grands pas de temps.

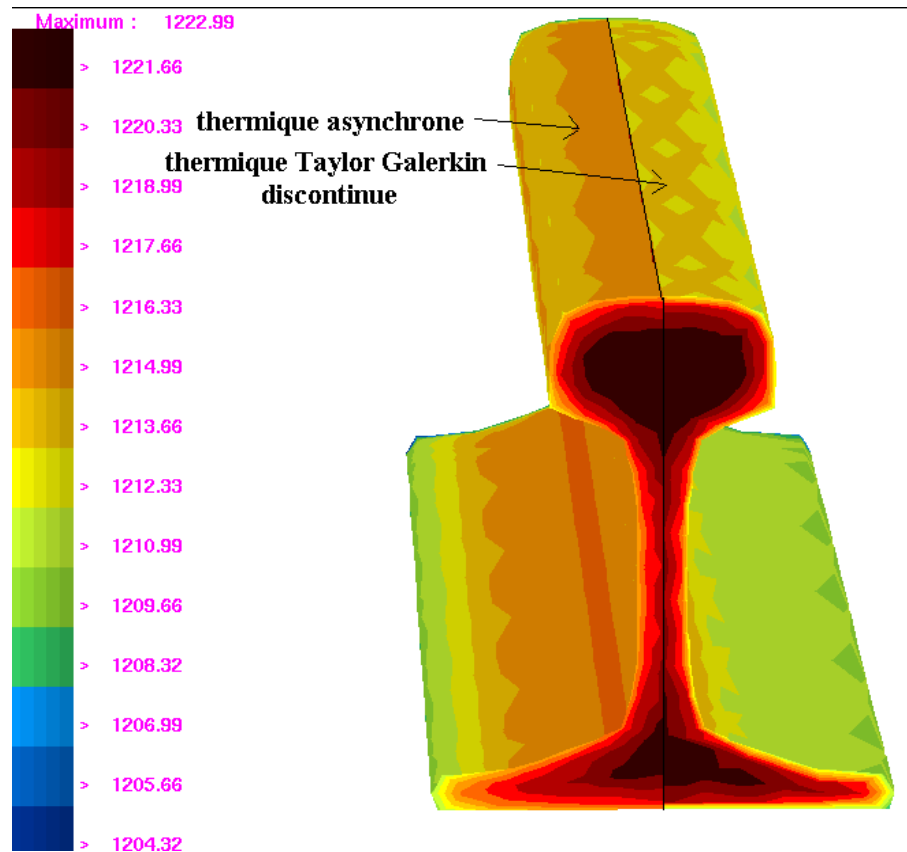


FIG. 3.21 – Comparaison calcul 3D avec thermique asynchrone à gauche, et thermique Taylor Galerkin discontinue à droite, coupe d'un rail.

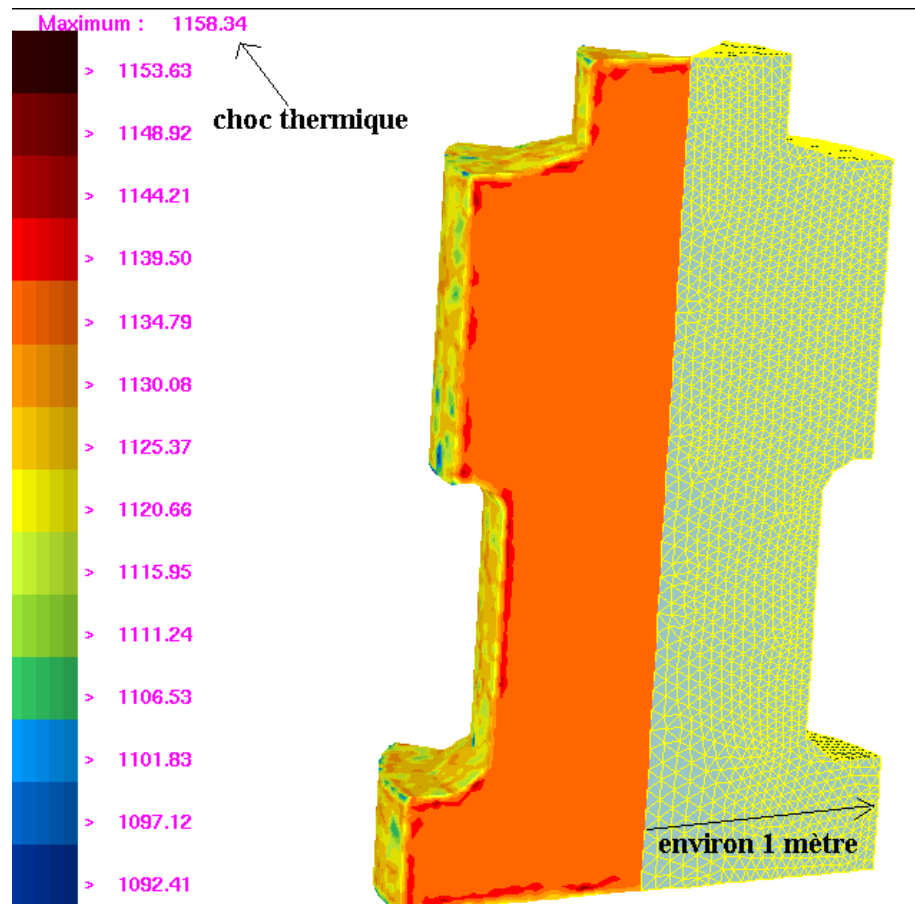


FIG. 3.22 – Calcul thermique d'une pièce massive de grande dimension, pièce Creusot-Loire-Industrie.

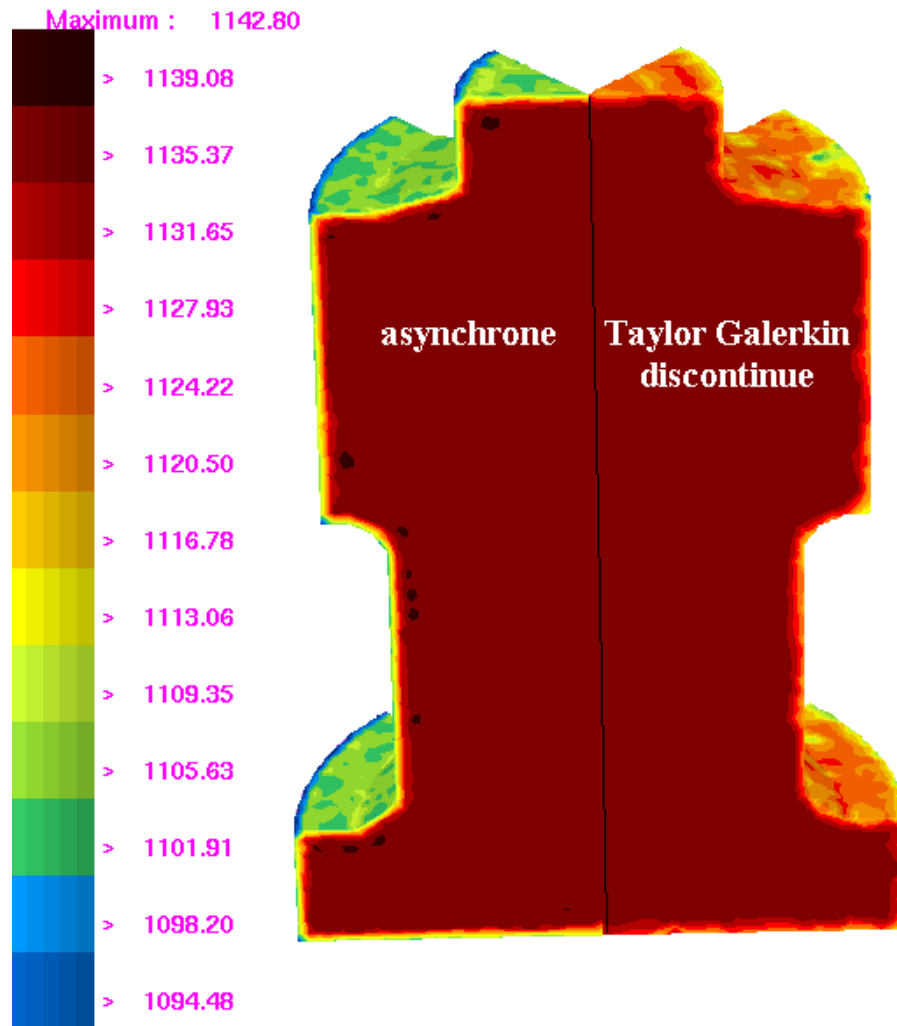


FIG. 3.23 – Calcul thermique d'une pièce massive de grande dimension, à gauche thermique asynchrone, à droite thermique Taylor Galerkin discontinue, température initiale $1138^{\circ} K$.

3.6 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre une méthodologie de résolution de la thermique en condition de refroidissement sévère. Nous avons montré que malheureusement la méthode standard Galerkin n'est pas suffisante et qu'intrinsèquement, elle conduit, lorsque le refroidissement est rapide, à des oscillations spatiales. Ces problèmes sont reliés directement à la taille de maille en surface et au pas de temps utilisé, qui sont intimement liés pour obtenir une solution E.F. stable et non-oscillante.

- Une possibilité pour éviter le choc thermique est le raffinement de maillage, comme sur la *figure 7.34* où on a raffiné la *peau* d'un pignon maillé (maillage topologique [Coupez98]) pour le choc thermique (calcul que nous traiterons plus tard). La limite de cette méthode est essentiellement liée au coût du calcul sur le maillage construit. Une meilleure adaptation anisotrope, pas réalisable encore aujourd'hui, permettrait de résoudre ce problème.

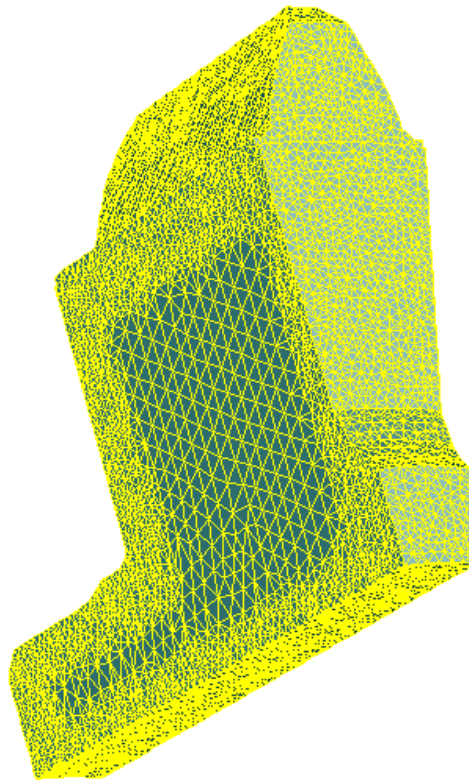


FIG. 3.24 – *Exemple de maillage adaptatif pour le choc thermique, raffinement en peau, pièce PSA.*

- Nous avons donc cherché des méthodes alternatives, permettant de résoudre correctement le champ de température, tout en n'augmentant pas le nombre de noeuds déjà important. Nous avons proposé deux méthodes, l'une basée sur la thermique Galerkin associée à la thermique asynchrone, l'autre, plus récente, qui repose sur une résolution mixte en température/flux de l'équation de la chaleur. La thermique asynchrone permet dans une gamme de taille de maille de lisser le choc thermique et d'obtenir un champ de température acceptable qui permettra de faire un calcul

- thermo-mécanique. Pour des cas très sévères, la méthode mixte qui s'affranchit des gradients, par l'absence de gradient dans l'interpolation, permet d'obtenir une solution correcte du champ de température, et qui ne va pas à l'encontre d'une évolution *physique*. Cette méthode ne nécessite pas de résolution de système linéaire, mais en contre partie, le pas de temps est petit (automatiquement calculé) pour conserver la stabilité du schéma explicite. Une option que nous proposons est un calcul initial avec la thermique Taylor Galerkin discontinue, et lorsque les gradients sont bien établis faire une méthode de continuation avec la thermique Galerkin asynchrone.
- Nous avons mis en place une gestion automatique du pas de temps en fonction de l'évolution du refroidissement. Le pas de temps s'adapte à la géométrie et aux conditions limites pour conserver un refroidissement de consigne. Cette méthode simple permet de gagner un gain de temps considérable en résolution thermique Galerkin pour une erreur négligeable par rapport à un calcul à pas petit et constant.

Bibliographie

- [Beck et al.92] Beck (J.V.) et A.M. – Analysis of quenching and heating processes using inverse heat transfert method. *Proceedings of the first international conference on quenching and control of distortion, Chicago, Illinois, USA*, septembre 1992.
- [Carslaw et al.59] Carslaw (H.S.) et Jaeger (J.C.). – *Conduction of Heat in Solids*. – Oxford University Press, 1959.
- [Coupez et al.97] Coupez (T.) et Baranger (J.). – Convection et diffusion pour des éléments finis discontinus p0. – 1997. à paraître.
- [Coupez98] Coupez. (T.). – *Adaptive meshing for forming processes*, chap. Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation. – M. Cross and al, July 1998.
- [Eriksson et al.87] Eriksson (K.) et Johnson (C.). – Error estimates and automatic time step control for nonlinear parabolic problems. *SIAM J NUMER ANAL*, vol. 24, n° 1, February 1987, pp. 12–23.
- [Jaouen98] Jaouen (O.). – *Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l'analyse thermo-mécanique du refroidissement des pièces coulées*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1998.
- [Leblond et al.83] Leblond (J.B.), Devaux (J.) et Dubois (D.). – Numerical methods for calculating thermal stresses and hydrogen diffusion. *SMIRT conference-Chicago*, 1983.
- [Pichelin et al.98] Pichelin (E.) et Coupez (T.). – A taylor discontinuous galerkin method for thermal solution in 3d mold filling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 163, 1998, pp. 359–371.
- [Pichelin98] Pichelin (E.). – *Calcul par éléments finis du remplissage 3D pour fluides visqueux incompressibles. Application à l'injection*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1998.
- [Roddier91] Roddier (F.). – *Distributions et Transformation de Fourier*. – Mc Graw-Hill, 1991.
- [Soyris90] Soyris (N.). – *Modélisation tridimensionnelle du couplage thermique en forgeage*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1990.

- [Tamma96] Tamma (T.Ouyang K.K). – On adaptative time stepping approaches for thermal solidifications processes. *INT. J. NUM .METH. Heat Fluid Flow*, vol. 6, n° 2, 1996, pp. 37–50.
- [Tronel93] Tronel (Y.). – *Contribution à la modélisation thermo-mécanique et physique du forgeage à chaud*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1993.

Chapitre 4

Analyse du couplage thermo-mécanique

Sommaire

4.1	Couplage thermo-mécanique	94
4.2	Trempe d'un cylindre en Aluminium	96
4.2.1	Résultats: températures, contraintes dans le cylindre	96
4.2.2	Comparaison élément P1/P1 non compatible et MINI-élément	98
4.3	Conclusion	98
	Bibliographie	98

Le couplage thermo-mécanique dans les travaux de simulation numérique des procédés de mise en forme des métaux a été étudié à plusieurs reprises au *Cemef*. Citons pour mémoire [Soyris90] pour la forge, [Colonna et al.92] pour le traitement thermique avec RefProf, et [Jaouen98] pour la fonderie, . On trouve également beaucoup d'exemples dans la bibliographie, comme récemment [Chiumenti98].

4.1 Couplage thermo-mécanique

Sur chaque incrément, température et vitesse/pression sont les inconnues du problème couplé. Le problème global à résoudre est:

$$P(v, p, T) = \begin{bmatrix} K_{uu} & K_{uT} \\ K_{Tu} & K_{TT} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ T \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} F_u \\ F_T \end{bmatrix} = O, \quad (4.1)$$

Pour simplifier, ici u représente les inconnues mécaniques v, p et T la température, K les matrices locales et F les vecteurs forces. Les algorithmes les plus connus, pour une résolution directe du problème 4.1 couplé, sont les méthodes Newton-Raphson. Un des inconvénients de la résolution globale est le déconditionnement des matrices car les termes K sont d'ordres différents. Un autre inconvénient est l'augmentation de la taille de la matrice à résoudre.

[Habraken89] a proposé une résolution globale, mais la prise en compte des changements de phases rend le système 4.1 très complexe, car il n'existe pas de dérivées analytiques des termes de couplage. On peut utiliser des dérivées numériques, mais [Habraken89] a montré que cela était très instable. [Chiumenti98] propose d'utiliser un algorithme de résolution par bloc itératif. Le problème s'écrit de la manière suivante:

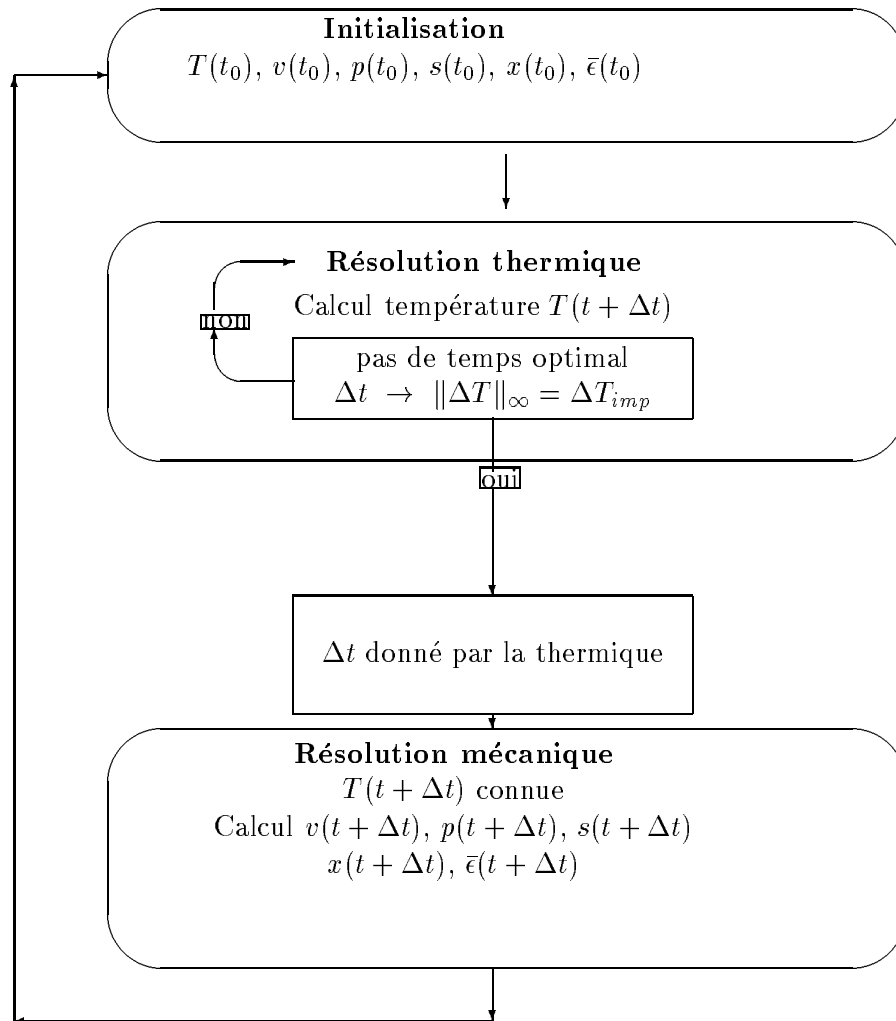
$$\begin{aligned} K_{uu}^{(i)} u^{(i)} &= F_u - K_{uT}^{i-1} T^{(i-1)}, \\ K_{TT}^{(i)} T^{(i)} &= F_T - K_{Tu}^{(k)} u^{(k)}, \\ k &= i-1, \text{ ou } k = i. \end{aligned} \quad (4.2)$$

On considère la résolution du premier bloc mécanique en utilisant les blocs thermiques de l'incrément précédent. Nous proposons un découplage où P devient:

$$P(v, p, T) = \begin{cases} P_1(T)_{v,p} = 0, \\ P_2(v, p)_T = 0. \end{cases} \quad (4.3)$$

Le calcul est fait de manière alternée par incrément. On utilise le même pas de temps pour les problèmes P_1 et P_2 . La thermique est donc calculée avec un incrément de retard par rapport au champ de vitesse et pression. L'algorithme de résolution que nous adoptons est présenté sur la *figure 4.1*.

FIG. 4.1 – Algorithme de résolution couplée thermo-mécanique.



4.2 Trempe d'un cylindre en Aluminium

Ce test a pour but de vérifier les modifications effectuées dans Forge3©, Forge2© pour la simulation de la trempe.

On simule une trempe d'un cylindre en aluminium de rayon 50 mm. La hauteur est fixée à plus de quatre fois le rayon pour limiter les effets de bord sur la section à mi-hauteur du cylindre. La rhéologie est élastoplastique (cas limite de notre modèle). Le coefficient de transfert h est fonction de la température de surface et donné sur la *figure 3.13*.

Ce test correspond à un cas traité antérieurement au LSG2M [Archambault76] et déjà utilisé dans [Colonna92]. Par conséquent, les données du test sont accessibles dans [Archambault76].

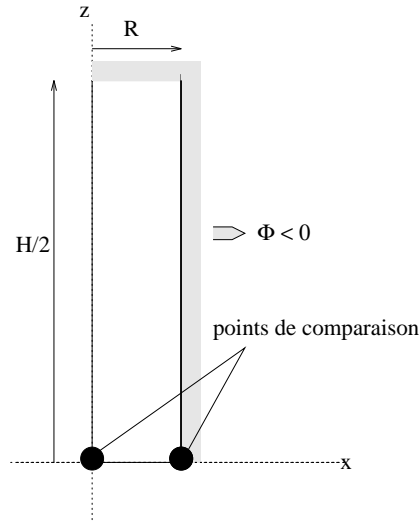


FIG. 4.2 – Schéma de la trempe simulée

4.2.1 Résultats: températures, contraintes dans le cylindre

L'évolution de la température est présentée sur la *figure 4.3*. Le profil de température est identique entre le calcul 2D et 3D.

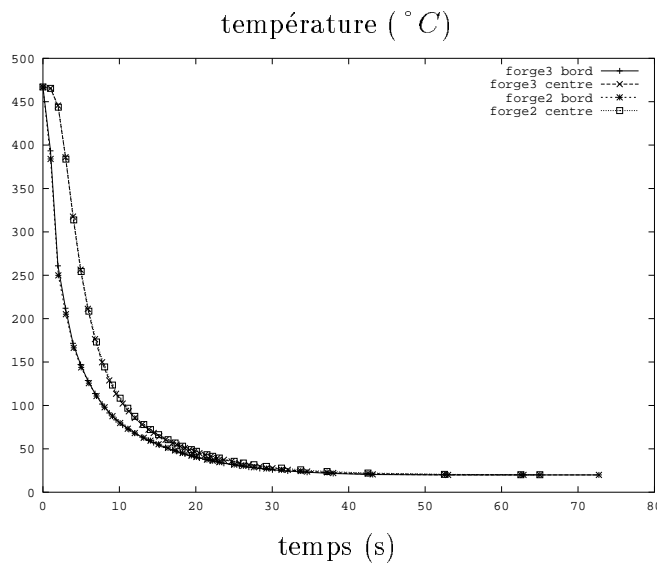


FIG. 4.3 – Comparaison 2D-3D : évolution de la température.

Le profil d'évolution de la contrainte axiale est de nature thermique (*figure 4.4 et 4.5*). La couche surfacique se refroidissant plus rapidement que le cœur du cylindre, elle ne peut pas se contracter par effet dilatométrique et se trouve en état de traction. Le phénomène est inversé pour le cœur, qui se trouve en état de compression. La contrainte en surface

dépasse la contrainte d'écoulement et plastifie toute la région de la peau. La plastification hétérogène sur la section, crée une inversion du profil des contraintes, la peau passe en compression, le cœur en traction. On constate une bonne similitude entre les résultats 2D et 3D. L'écart entre les résultats de Forge3 et Quest¹ peut être attribué aux gradients thermiques légèrement différents qui peuvent entraîner un écart sur la valeur des contraintes en peau.

Le profil des contraintes résiduelles est donné sur la *figure 4.6*.

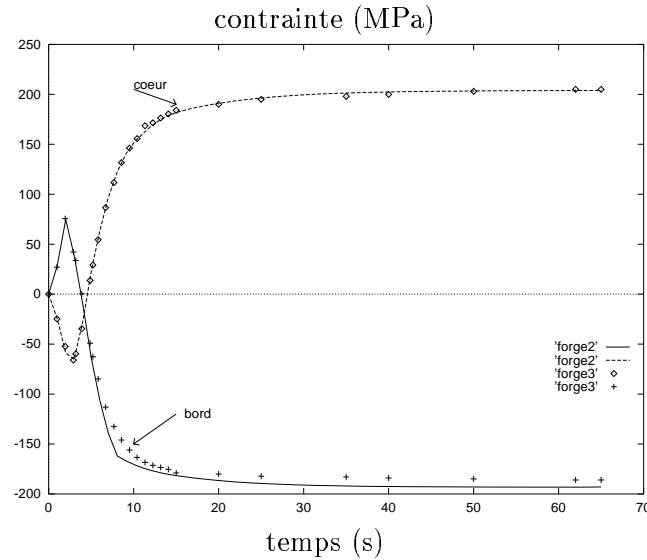


FIG. 4.4 – *Comparison 2D-3D : contrainte axiale $\sigma_{zz} = f(t)$*

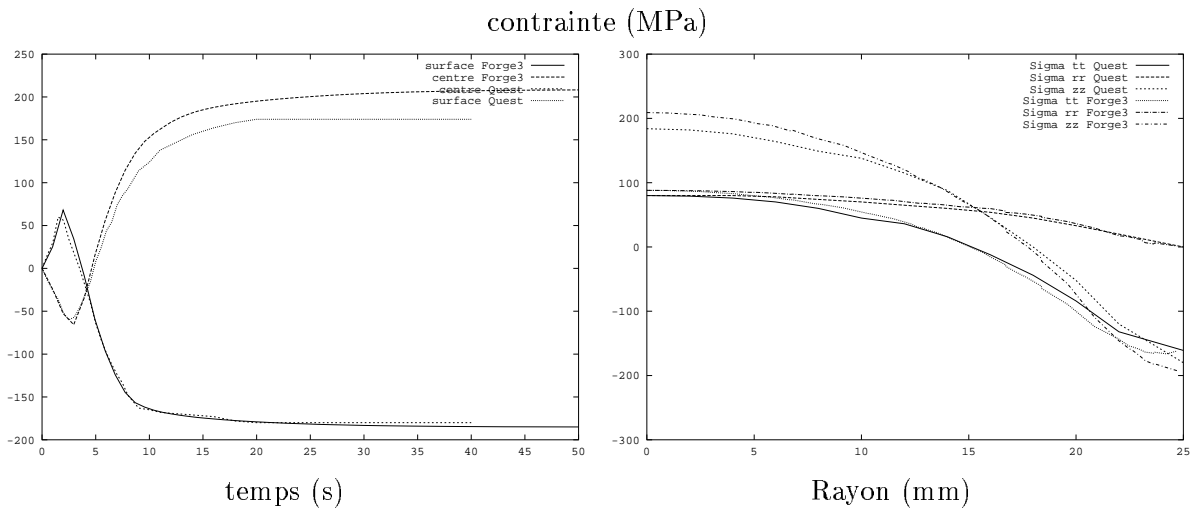


FIG. 4.5 – *Comparison Forge3 Quest: contrainte axiale $\sigma_{zz} = f(t)$ et contraintes résiduelles*

L'influence du type d'écrouissage isotrope ou cinématique est présenté sur la *figure 4.7*. L'écart de contrainte après un cycle traction-compression est bien observé et reproduit l'effet *Baushinger*.

1. Quest est un logiciel du LSG2M (Ecole des Mines de Nancy)

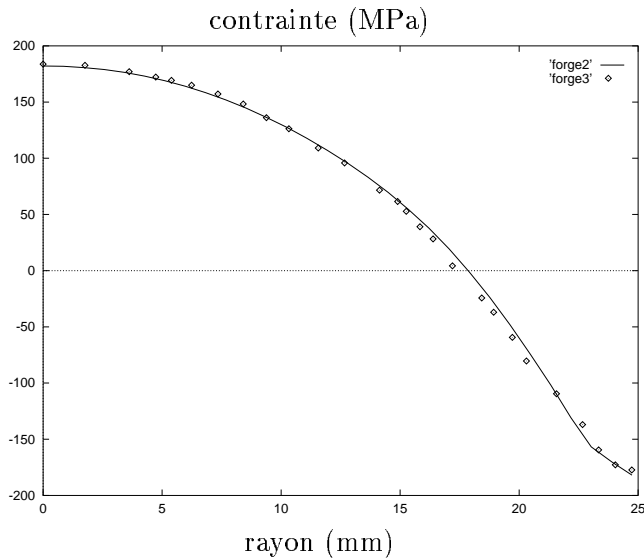


FIG. 4.6 – *Comparaison 2D-3D : contrainte résiduelle $\sigma_{zz} = f(R)$*

Finalement, en fin de trempe, on peut observer un profil de déformations résiduelles responsables des contraintes résiduelles (sur la *figure 4.8*). Les cartes d'isovaleurs montrent une bonne corrélation entre les courbes, on retrouve les zones fortement plastifiées en surface et au coeur. L'action des effets de bord est également identique créant une zone assez perturbée.

4.2.2 Comparaison élément P1/P1 non compatible et MINI-élément

Pour illustrer le chapitre §2.2.5.1 nous comparons l'élément P1/P1 et le MINI-élément (ou P1/P1 stabilisé).

Sur la figure 4.9, on trouve un champ de vitesse pratiquement identique pour les deux éléments. Par contre le champ de pression figure 4.10 est très différent; pour l'élément P1/P1, on observe des iso-valeurs assez chahutées, qui sont dues aux modes *parasites* en pression que nous avons évoquées. Par contre le MINI-élément présente un profil de pression correct. La stabilisation par *condensation de la bulle* permet d'éliminer les modes de pression parasites.

4.3 Conclusion

Ce test de trempe nous a permis de valider le couplage thermomécanique dans le cas d'une trempe d'un cylindre en aluminium (monophasé). Nous pouvons donc envisager l'étude de l'intégration des phénomènes de transformation de phase dans notre modèle numérique.

Bibliographie

- [Archambault76] Archambault (P.). – *Contribution à l'optimisation du traitement d'un alliage d'aluminium de hautes caractéristiques*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Nancy, 1976.

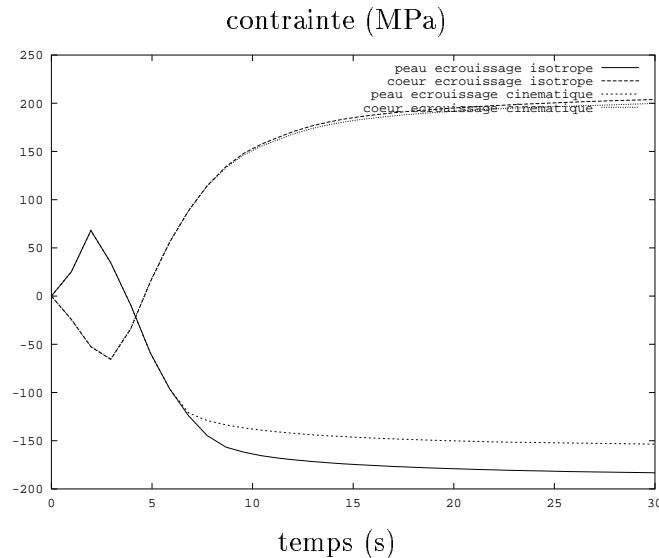
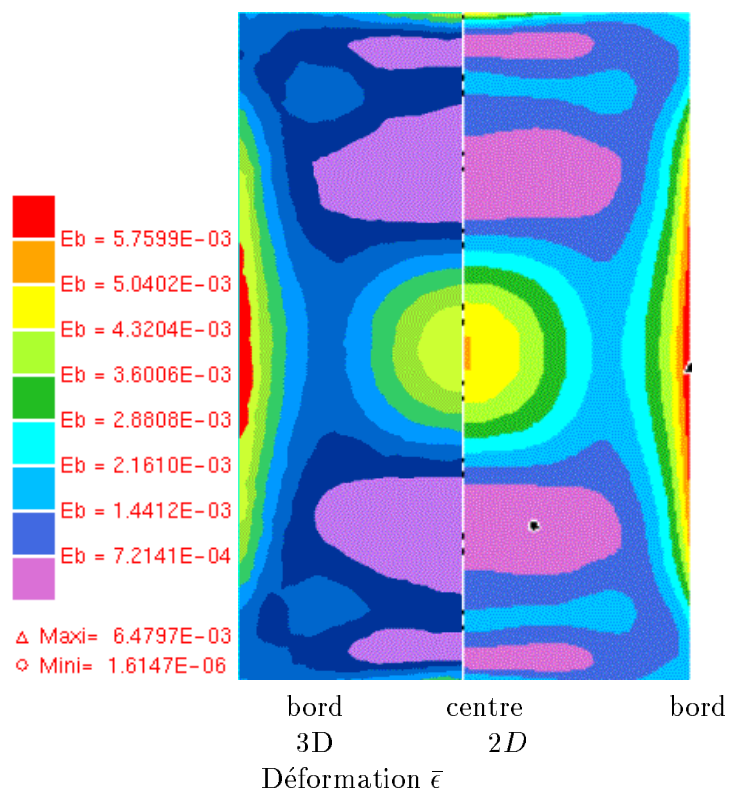


FIG. 4.7 – Comparaison de la contrainte axiale en fonction du type d'écrouissage, calcul 3D.

- [Chiumenti98] Chiumenti (M.). – *Constitutive modelling and numerical analysis of thermo-mechanical phase-change systems*. – Thesis doctoral, Universitat politecnica de catalunya, Escola Tècnica Superior d'Enginyers de Camins, Canals i Ports, Setembre 1998. Manuscrit en Anglais.
- [Colonna et al.92] Colonna (F.), Massoni (E.), Denis (S.), Chenot (J-L.), Wendenbaum (J.) et Gauthier (E.). – On thermo-elastic-viscoplastic analysis of cooling processes including phases changes. *Journal of Materials Processing Technology*, n° 34, 1992, pp. 525–532.
- [Colonna92] Colonna (F.). – *Modélisation numérique du refroidissement des rails*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1992.
- [Habraken89] Habraken (A-M.). – *Contribution à la modélisation du formage des métaux par la méthode des éléments finis*. – Thèse de doctorat, Université de Liège, 1989.
- [Jaouen98] Jaouen (O.). – *Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l'analyse thermo-mécanique du refroidissement des pièces coulées*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1998.
- [Soyris90] Soyris (N.). – *Modélisation tridimensionnelle du couplage thermique en forgeage*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1990.

FIG. 4.8 – *Comparaison des déformations plastiques résiduelles 2D et 3D en fin de trempe.*

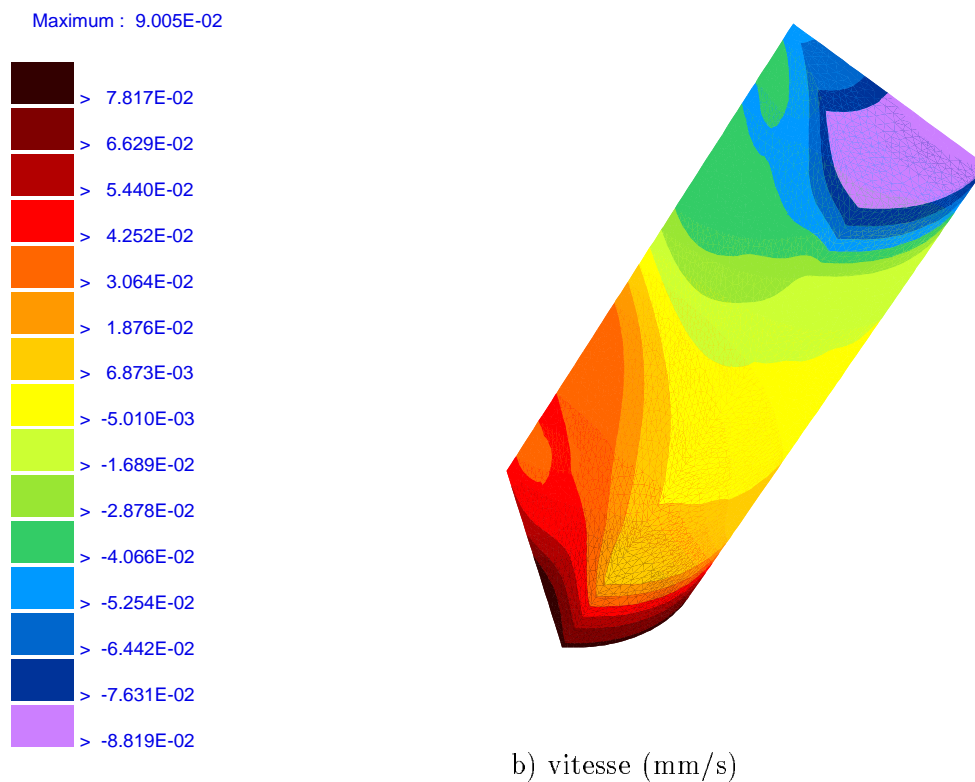
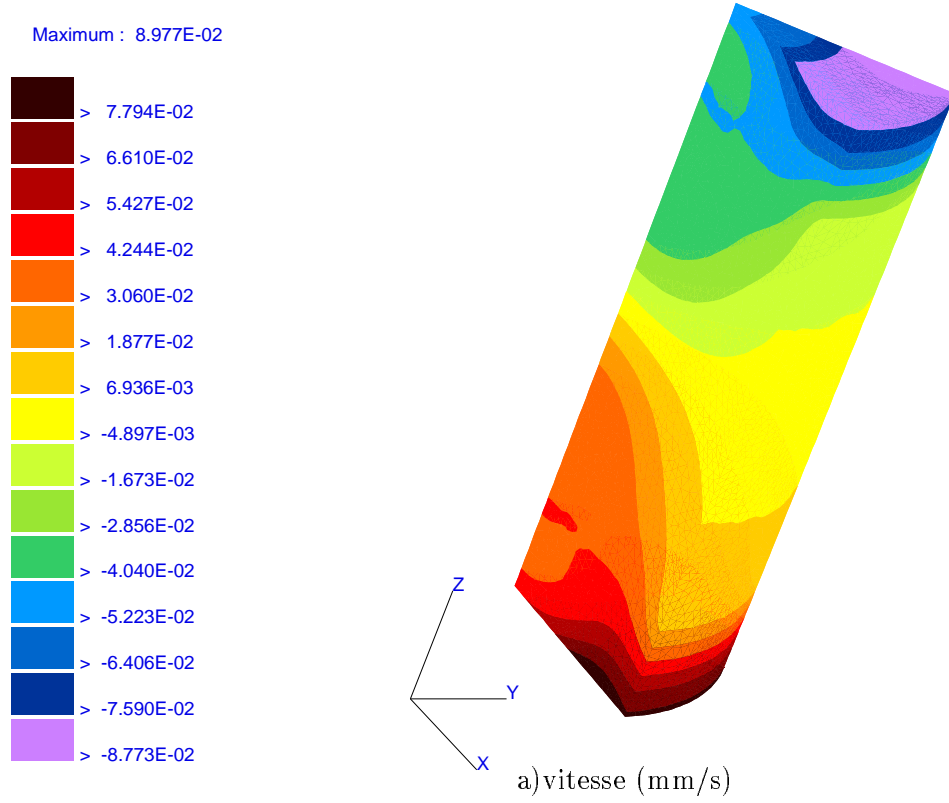


FIG. 4.9 – comparaison champ de vitesse V_z ; a) $P1/P1$ pas compatible, b) MINI-élément

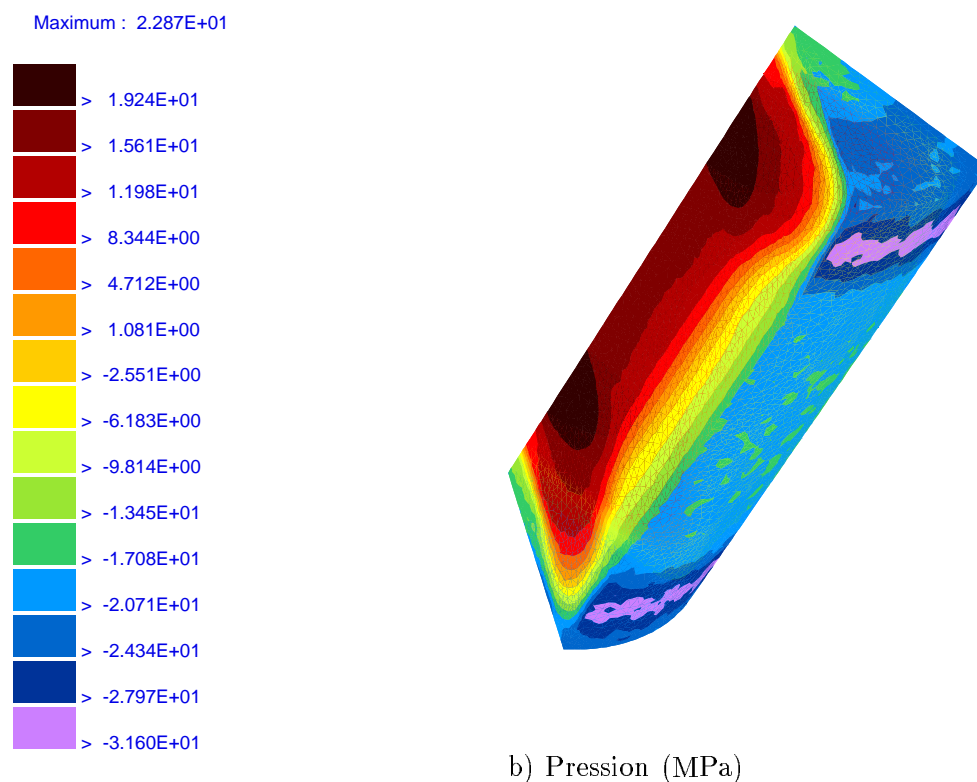
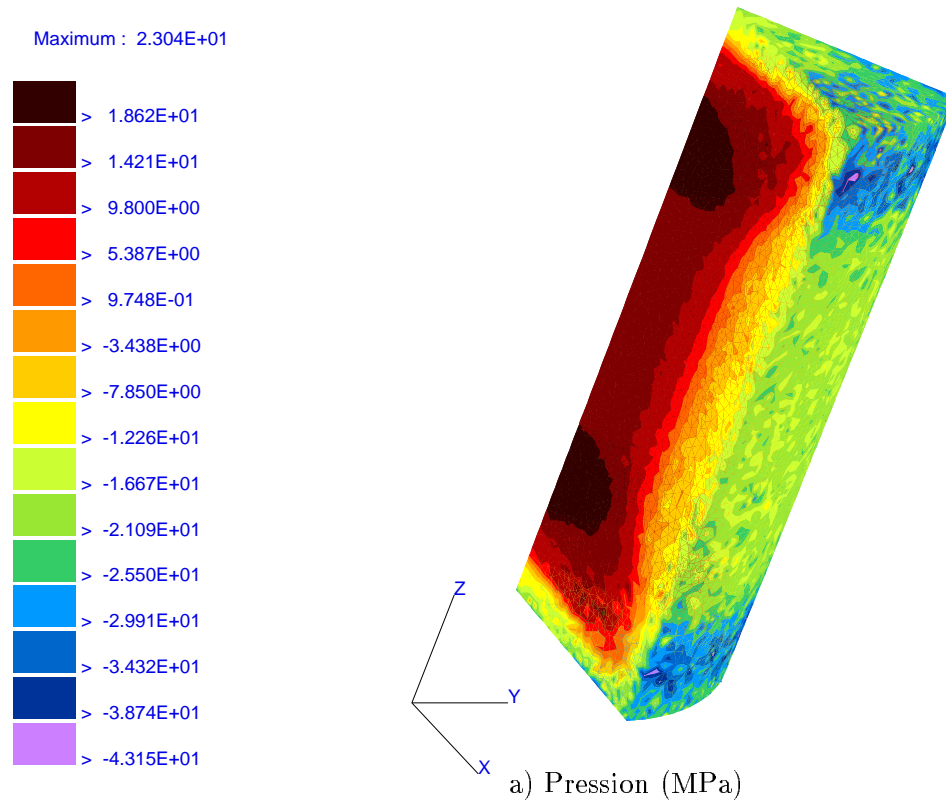


FIG. 4.10 – comparaison champ de pression; a) $P1/P1$ pas compatible, b) MINI-élément

Chapitre 5

Calcul des transformations de phases

Sommaire

5.1	Introduction	104
5.2	Modélisation des cinétiques de transformations de phases dans les aciers	104
5.2.1	Généralités sur les courbes Température-Temps-Transformation	104
5.2.2	Les modèles de cinétique des transformations de phases	105
5.2.3	Théories cinétiques <i>anisothermes</i> : extension du formalisme d'Avrami	107
5.2.4	Autres théories de cinétique	110
5.2.5	Transformations sans diffusion:	114
5.2.6	Quel modèle de transformation doit-on choisir?	114
5.3	Description du modèle de transformation de phase choisi	115
5.3.1	Exemple d'application du modèle de transformation de phase	117
5.4	Prise en compte des hétérogénéités en carbone	119
5.4.1	Modèle de modifications des diagrammes TTT avec la teneur en carbone	119
5.4.2	Exemple d'application de décalage d'un TTT avec la teneur en carbone	123
5.5	Prise en compte des contraintes et des déformations	126
5.6	Conclusion	127
	Bibliographie	128

5.1 Introduction

Dans le cadre de ce travail, la prise en compte des évolutions métallurgiques des aciers est limitée au cas du refroidissement. Les procédés de chauffage ou de revenu ne sont pas abordés, et pourraient constituer un développement ultérieur à cette étude sur la base du même modèle déjà développé. Par contre on ne se limitera pas à l'étude du refroidissement à partir d'un état initial parfait (i.e. état zéro: tout homogène), et on étudiera l'influence des hétérogénéités en carbone issues des étapes précédentes (fonderie, traitement thermochimique), et leurs influences sur les transformations de phases des aciers.

5.2 Modélisation des cinétiques de transformations de phases dans les aciers

Notre objectif est de déterminer les contraintes résiduelles en fin de trempe. L'analyse des cinétiques de transformation de phase pourra être couplée avec le calcul mécanique pour obtenir un modèle prédictif des contraintes résiduelles. Rappelons qu'il existe des modèles basés sur des approches statistiques à partir d'un grand nombre de diagrammes TRC (Température-Refroidissement-Continu). On citera la méthode du PRE-VER [Mainier et al.78] qui permet de relier les vitesses critiques de trempe (vitesse minimale pour passer devant le *nez* de transformation) en fonction de la composition chimique et aux conditions d'austénitisation. Cette méthode s'applique essentiellement aux aciers faiblement alliés, et les vitesses critiques de trempe bainitiques et martensitiques s'écrivent par exemple:

$$\begin{aligned} \ln V_{mart} &= 9.81 - (4.62 \%C + 1.05 \%Mn + 0.54 \%Ni + 0.5 \\ &\%Cr + 0.66 \%Mo + 0.00183Pa), \\ \ln V_{bain} &= 10.17 - (3.8 \%C + 1.07 \%Mn + 0.7 \%Ni + 0.27 \\ &\%Cr + 0.38 \%Mo + 2 \%Mo^{\frac{1}{2}}0.0019Pa). \end{aligned} \tag{5.1}$$

Pa est un paramètre thermodépendant. Ces modèles permettent également de déterminer en fin de trempe la proportion de chaque phase et la dureté de l'acier. Si ces méthodes sont satisfaisantes pour *calibrer* un refroidissement industriel, elles ne sont pas assez précises pour remonter aux contraintes internes durant la trempe par un calcul couplé avec la mécanique. Pour cela on aura recourt à des méthodes capables de définir en chaque instant l'état structural du matériau. La variable interne choisie est la fraction transformée de chaque phase caractérisant ainsi l'état de transformation du matériau.

5.2.1 Généralités sur les courbes Température-Temps-Transformation

L'étude des traitements thermiques a fait un bon en avant vers 1930-32, lorsqu'à l'instigation des travaux de Bain, on a pu séparer l'action des deux facteurs temps et température sur le déroulement de la transformation, par la réalisation de traitements isothermes. Cette méthode, qui consiste à porter rapidement un échantillon austénisé à la température voulue dans un bain de trempe maintenu à température constante et à étudier les progrès de la transformation en fonction du temps, permet de préciser l'aspect micrographique des structures formées à chaque température.

L'usage est de présenter les résultats obtenus par une courbe TTT (Température-Temps-Transformation) joignant sur un diagramme température-logarithme du temps, les points correspondant pour chaque température (cf *figure 5.1*):

- au temps au bout duquel commence la transformation;
- au temps au bout duquel elle finit;
- et si besoin un temps intermédiaire, comme le temps au bout duquel la transformation atteint 50%.

Généralement, des lignes supplémentaires marquent l'apparition d'un constituant micrographiquement nouveau au cours du déroulement même de la transformation.

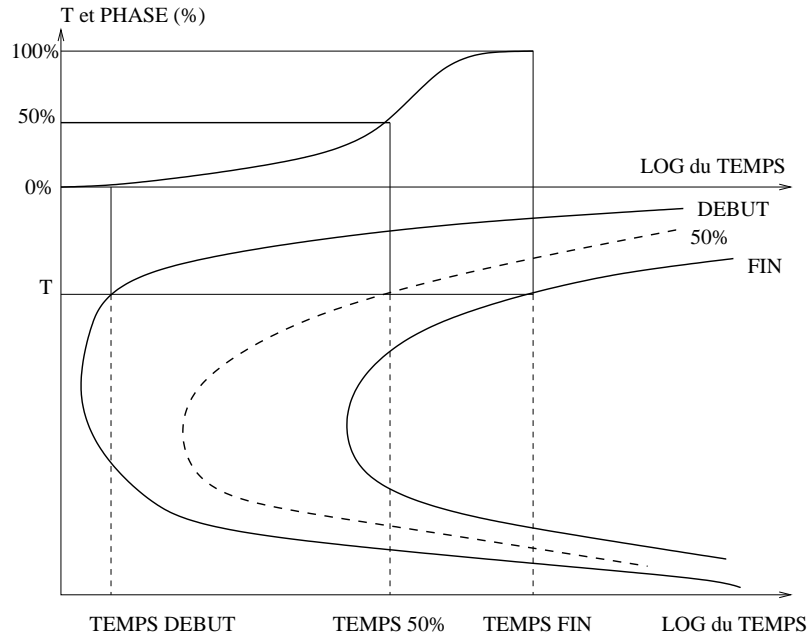


FIG. 5.1 – *Tracé schématique des courbes TTT.*

5.2.2 Les modèles de cinétique des transformations de phases

L'acier subit un refroidissement jusqu'à température ambiante qui modifie la structure en décomposant l'austénite stable à chaud, γ , en ferrite α ou en perlite $\alpha + Fe_3C$, suivant la composition de l'alliage *figure (5.2)*.

Dans la pratique, ces transformations sont suffisamment éloignées de l'équilibre thermodynamique pour que les renseignements apportés par le diagramme d'équilibre sur la nature et les proportions relatives des constituants formés soient utilisables. Il faut donc définir une cinétique de transformation qui décrira, hors équilibre, la vitesse ainsi que la proportion des transformations des nouvelles phases.

La prévision des cinétiques de transformation de phase des aciers a connu un essor important depuis l'intérêt porté à l'étude des microstructures, permettant d'atteindre des propriétés de plus en plus spécifiques. L'approche géométrique de Johnson-Mehl et Avrami [Johnson et al.39] est pratiquement la seule utilisée dans la littérature. Kolmogoroff et Evans ont obtenu des résultats équivalents en utilisant des démarches statistiques différentes. Des approches différentes comme celles proposées par Leblond [Leblond et al.84]

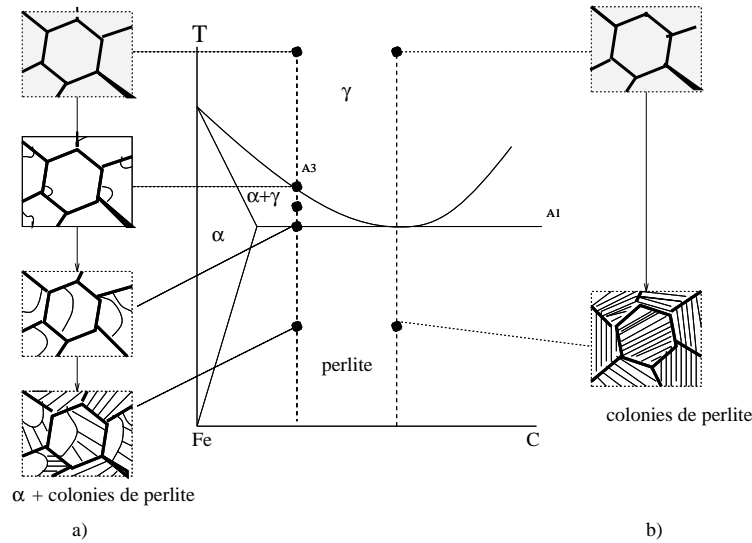


FIG. 5.2 – Évolution de la microstructure à l'équilibre thermodynamique durant le refroidissement en fonction de la composition initiale de l'acier, pour des aciers hypoeutectoïdes a) et eutectoïdes b).

s'écartent de ces théories, mais bien que le formalisme soit très différent on verra que l'évolution des cinétiques est peu changée. Plus récemment, des approches nouvelles basées sur des modèles de germination croissance à une échelle plus fine se sont développées [Badeshia92], [Suehori et al.92], [Saito et al.92]. Ces approches n'utilisent pas l'aspect statistique des approches phénoménologiques, mais se basent sur des observations morphologiques. Ces nouvelles approches sont intéressantes car elles permettent d'avoir une information supplémentaire sur la morphologie. Ces méthodes très prometteuses restent néanmoins encore limitées à des systèmes assez simples (transformation ferritique ou perlitique), et leurs développements ne sont pas encore assez aboutis pour être intégrés dans un modèle aux éléments finis 3D.

Sans décrire les théories des approches statistiques, que le lecteur pourra trouver dans [Billon87], nous nous contenterons de reprendre la forme la plus aboutie de l'équation d'Avrami qui sous les hypothèses suivantes, se met sous la forme de l'équation 5.2:

1. le rapport entre la vitesse de germination et la vitesse de croissance est invariable avec la température: *hypothèse iso-cinétique*.
2. lorsque tous les germes de la nouvelle phase apparaissent au début de la réaction, ils créent une condition de saturation de sites: *hypothèse de la germination instantanée*.
3. le volume de la phase mère est infini: *hypothèse de volume infini*.

$$y = 1 - \exp(-k(T)\eta(t)^{n(T)}), \quad (5.2)$$

n est le coefficient d'Avrami qui dépend du mode de germination et de la forme du germe croissant, k est fonction de la température, η est le temps caractéristique d'Avrami.

$$\eta(t) = \int_0^t q(u) du. \quad (5.3)$$

On définit par q , la probabilité par unité de temps qu'un germe soit activé. Cette équation est générale et peut être utilisée dans les cas isothermes ou anisothermes (sous réserve des hypothèses ci-dessus). A priori si on connaît les paramètres k, n et η , on peut déterminer la fraction transformée quelque soit le chemin thermique suivi. C'est l'accessibilité des données expérimentales qui conduit à des simplifications de l'équation 5.2. Ces simplifications conduisent à traiter le problème suivant deux approches bien distinctes, que l'on trouve dans la bibliographie.

5.2.3 Théories cinétiques *anisothermes*: extension du formalisme d'Avrami

Ces théories se basent sur la décomposition du processus thermique en étapes élémentaires, et il est possible d'accéder aux cinétiques anisothermes à partir de la connaissance des cinétiques isothermes. Le passage est réalisé en appliquant le *principe d'additivité* selon un cumul d'étapes élémentaires.

1. [Inoue et al.92] (Hearth©) utilise directement l'équation d'Avrami 5.2, il écrit pour les transformations avec diffusion la cinétique suivante:

$$y = 1 - \exp\left(- \int_0^t f(T) f_\sigma(\sigma) f_c(C) (t - \tau)^3 d\tau\right), \quad (5.4)$$

les fonctions f , f_σ , f_c sont issues des diagrammes TTT en faisant varier la contrainte σ et la teneur en carbone C et permettent de prendre en compte les hétérogénéités en carbone, ainsi que l'état de contrainte.

2. Certains auteurs utilisent une forme différentielle de l'équation d'Avrami [Hamata95], [Reti et al.99] sous la forme:

$$\frac{dy}{dt} = nb^{\frac{1}{n}} (y_{max} - y) \ln\left(\frac{y_{max}}{y_{max} - y}\right)^{\frac{n-1}{n}}. \quad (5.5)$$

L'intérêt d'une telle formulation est d'obtenir directement une forme analytique de la dérivée en fonction du temps de la cinétique. Le taux de croissance d'une phase \dot{y} est nécessaire pour les couplages thermo-mécaniques, et cela évite l'erreur commise par une approximation discrète par différence finie par exemple.

3. [Fernandes85] utilise la méthode du temps fictif introduite par [Pumphrey et al.48], qui permet de déterminer les cinétiques de transformation de phases au cours du chauffage et du refroidissement à partir des cinétiques de transformation en conditions isothermes. Dans cette approche, on sépare l'incubation et la croissance, la croissance ne s'effectue qu'après une période d'incubation définie par le principe de l'additivité.

– Période d'incubation:

Elle est déterminée par la méthode de Scheil. L'incubation se termine lorsque la *somme* de Scheil atteint l'unité:

$$\int_0^{t_0} \frac{dt}{\tau(T)} = 1, \quad (5.6)$$

$\tau(T)$ est le début de transformation isotherme à la température T .

- Période de croissance:

La croissance de la nouvelle phase commence lorsque la somme de Scheil est égale à l'unité. La courbe d'évolution thermique $T(t)$ est partitionnée en une série d'étapes isothermes. Pour chaque palier isotherme, la fraction transformée est calculée avec l'équation 5.2. Dans ce cas, le temps caractéristique d'Avrami η est proportionnel au temps réel, et y prend la forme:

$$y_i = y_{i,max}(1 - \exp(-b_i t_i^{n_i})) \quad (5.7)$$

La forme de l'équation 5.7 est souvent présentée à tort comme la *loi d'Avrami*, elle est en fait la forme simplifiée pour une cinétique isotherme. $y_{i,max}$ est la fraction transformée maximale que l'on peut obtenir pour une transformation incomplète obtenue à partir du diagramme d'équilibre ou de l'approximation de Hultgren hors équilibre. n et b sont les paramètres cinétiques dépendant de la température et obtenus avec le diagramme TTT (souvent pour 10% et 90% de phase transformée). Cette équation est modifiée pour tenir compte du chemin thermique anisotherme.

4. Remarque sur les approches *temps fictif* et *différentiel*

Nous avons intégré le modèle différentiel par un schéma numérique Runge-Kutta 44 explicite¹. La *figure 5.3* représente les fractions transformées calculées avec les équations 5.7 et 5.5 pour une intégration avec deux pas de temps différents. Lorsque le pas de temps est faible, les courbes sont superposées. Quand celui-ci augmente, on a vu au § 3.4.2 que le pas de temps pouvait augmenter de plusieurs ordre de grandeur, l'intégration numérique de la méthode différentielle reste moins stable que la méthode du temps fictif puisqu'elle s'éloigne de la solution fine calculée avec un petit pas de temps. Un résultat similaire a été démontré par [Habraken89]. En faisant un développement limité à l'ordre 1 de l'équation 5.7, [Habraken89] obtient:

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \dot{y}(t)\Delta t, \quad (5.8)$$

où $\dot{y}(t)$ est définie par l'équation 5.5. La méthode du temps fictif utilise une dérivée implicite contrairement à la méthode Runge-Kutta 44 qui utilise une approximation explicite.

Le caractère exponentiel des lois de cinétiques de transformation justifie la mauvaise précision obtenue par l'intégration numérique Runge-Kutta 44 explicite. On pourrait subdiviser le pas de temps en sous-intervalles ou utiliser une méthode Runge-Kutta 44 implicite, cela entraînerait une augmentation inutile du temps de calcul. La stabilité des cinétiques de transformations vis à vis du schéma temporel deviendra très importante quand on effectuera le couplage complet thermo-metall-mécanique, en conclusion nous avons conservé la méthode du temps fictif malgré notre désir de définir une formulation différentielle.

5. Théorie cinétique de Kirkaldy

1. Runge Kutta 44 correspond à l'ordre 4 des dérivées utilisées, et au rang 4 de la méthode.

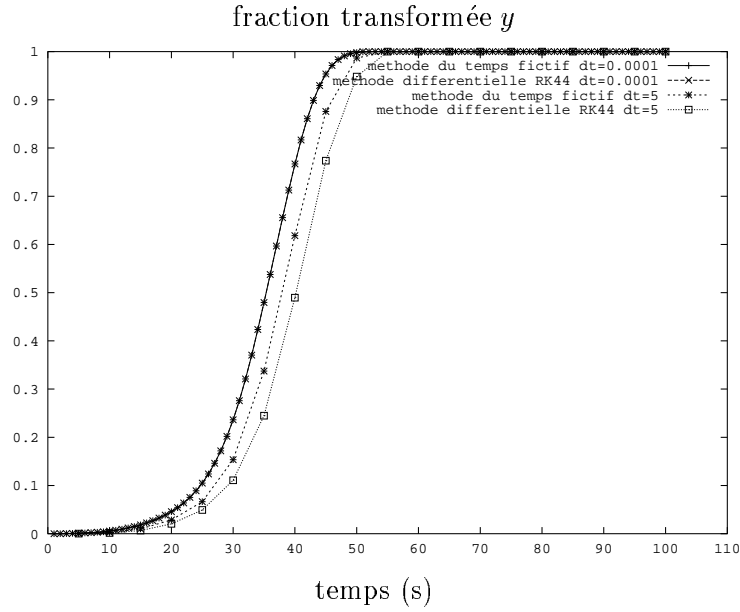


FIG. 5.3 – Comparaison des modèles temps fictif et différentiel pour trois pas de temps d'intégration, la vitesse de refroidissement est fixée à 1°C/s . Les coefficients cinétiques correspondent à la transformation de la perlite de l'acier XC80 [Denis et al.86],[Colonna et al.92].

Kirkaldy [Kirkaldy et al.90] a développé une approche, également fondée sur le principe d'additivité, qui consiste à calculer les diagrammes TTT des aciers à partir de la composition chimique et de la taille de grain. La loi d'évolution qu'il utilise est la suivante:

$$\frac{dy}{dt} = \mathcal{D}(G, T, y) y^m (1 - y)^p, \quad (5.9)$$

où \mathcal{D} est interprété comme un coefficient de vitesse, et $m < 1$, $p < 1$. En inversant la relation, le diagramme TTT est donné par:

$$\tau(y, T) = \int_0^y \frac{dx}{\mathcal{D}(G, x, T) x^m (1 - x)^p}, \quad (5.10)$$

qui définit τ comme le temps nécessaire à la transformation de la fraction de phase y à la température T . Il exprime la fonction \mathcal{D} comme homogène à une vitesse de croissance:

$$\mathcal{D} = \alpha(G) D \Delta T^q, \quad (5.11)$$

D est un coefficient de diffusion effectif, q est un coefficient déterminé empiriquement à partir des mécanismes de diffusion. ΔT est le sous refroidissement par rapport à la température de début de transformation à l'équilibre. α est une fonction de la taille de grain ASTM G . Finalement la forme choisie par les auteurs pour décrire les courbes de transformation TTT est la suivante:

$$\tau(y, T) = \int_0^y \frac{dx}{\alpha(G) D \Delta T^q x^{\frac{2(1-x)}{3}} (1-x)^{\frac{2x}{3}}}. \quad (5.12)$$

Ainsi pour chacun des domaines de transformations, et après un calage sur un grand nombre de nuances, le diagramme TTT est décrit dans sa totalité par l'ensemble des équations suivantes:

$$\begin{aligned} \tau_f(y, T) &= \int_0^y \frac{(59.6\% Mn + 1.45\% Ni + 67.7\% Cr + 244\%) Mo dx}{2^{\frac{G-1}{2}} \Delta T^3 \exp\left(\frac{-23500}{RT}\right) x^{\frac{2(1-x)}{3}} (1-x)^{\frac{2x}{3}}}, \\ \tau_p(y, T) &= \int_0^y \frac{(1.79 + 5.42(\%Cr + \%Mo + 4\%Mo\%Ni)) dx}{2^{\frac{G-1}{2}} \Delta T^3 D x^{\frac{2(1-x)}{3}} (1-x)^{\frac{2x}{3}}}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\frac{1}{D} = \frac{1}{\exp\left(\frac{-27500}{RT}\right)} + \frac{0.01\%Cr + 0.52\%Mo}{\exp\left(\frac{-37000}{RT}\right)},$$

$$\tau_b(y, T) = \int_0^y \frac{(2.34 + 10.1\%C + 3.8\%Cr + 19\%Mo) 10^{-4} f(x) dx}{2^{\frac{G-1}{2}} \Delta T^2 \exp\left(\frac{-27500}{RT}\right) x^{\frac{2(1-x)}{3}} (1-x)^{\frac{2x}{3}}},$$

où τ_f est le temps de transformation de la ferrite, τ_p est le temps de transformation de la perlite, τ_b est le temps de transformation de la bainite. Pour la bainite, une correction $f(y)$ a été introduite pour tenir compte du ralentissement de la transformation bainitique (stabilisation de l'austénite). Les auteurs ont écrit pour $f(x)$:

$$f(x) = \exp[x^2(1.9\%C + 2.5\%Mn + 0.9\%Ni + 1.7\%Cr + 4\%Mo - 2.6)]. \quad (5.14)$$

Ce modèle est intéressant car il permet de prendre en compte l'état local (carbone, taille de grain, autres éléments) sur la modification des diagrammes de transformation TTT. Ainsi pour une géométrie donnée, on serait capable, à partir de la composition, de définir les cinétiques de transformations de phase au cours du refroidissement. A partir de cette théorie, nous avons retracé les diagrammes TTT présentés par [Kirkaldy et al.90] pour les nuances 1050 (*figure 5.4*) et 5140 (*figure 5.5*). Sur ces graphes il ne faudra pas prendre en compte les courbes correspondant à la ferrite pour des températures en dessous de TH qui est un domaine où la ferrite n'existe pas.

5.2.4 Autres théories de cinétique

1. Théorie cinétique de Leblond

L'approche de Leblond [Leblond et al.84] (Sysweld©) est basée sur des diagrammes TRC.

On suppose la fraction à l'équilibre y_{eq} comme la solution stationnaire des équations d'évolution décrivant la cinétique de transformation de phase. y_{eq} est équivalent à

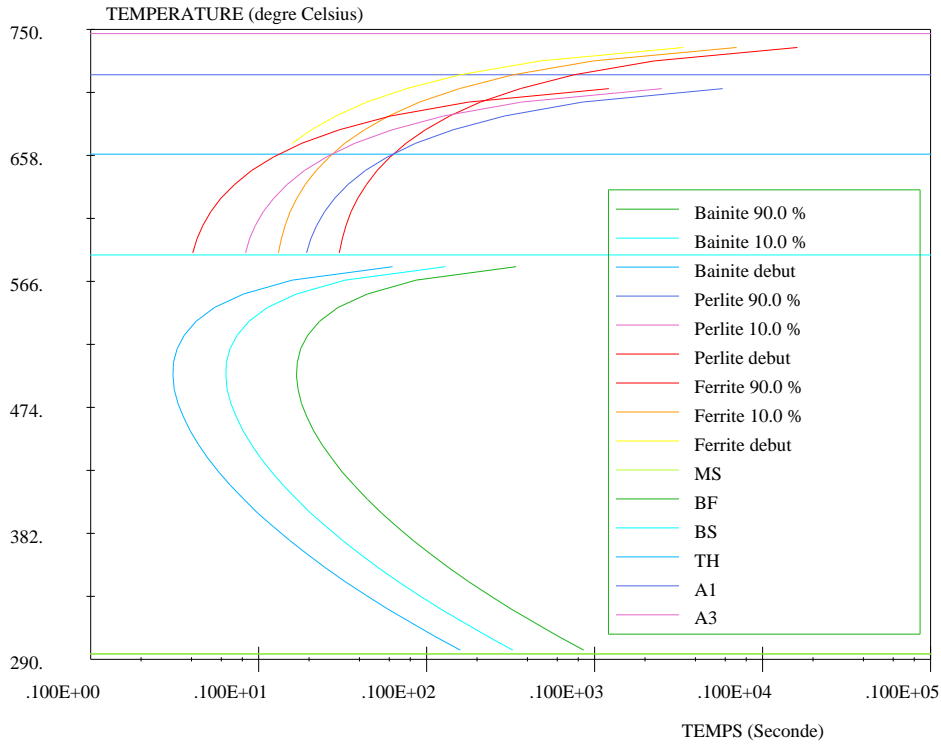


DIAGRAMME TEMPERATURE-TEMPS-TRANSFORMATION ACIER: 1050

 FIG. 5.4 – Diagramme TTT calculé par le modèle [Kirkaldy et al.90] pour l'acier 1050: 0.5 C, 0.91 Mn, 0.13 Si, $G = 8$.

y_{max} pour les théories utilisant le formalisme d'Avrami.

$$\dot{y} = f(y, T) \quad \text{avec} \quad f(y_{eq}, T) = 0 \quad \text{solution stationnaire}$$

Ainsi si on suppose que la fraction y , en condition anisotherme, n'est pas trop éloignée de la fraction y_{eq} à l'équilibre, on peut écrire un développement limité de la fonction $f(y, T)$ par rapport à y :

$$f(y, T) = f(y_{eq}, T) + \frac{\partial f(y_{eq}, T)}{\partial y} [y - y_{eq}]. \quad (5.15)$$

L'équation d'évolution de la cinétique devient,

$$\dot{y} = \frac{y_{eq} - y}{\tau(T)} \quad \text{avec} \quad \frac{1}{\tau} = -\frac{\partial f(y_{eq}, T)}{\partial y}, \quad (5.16)$$

où τ est un temps caractéristique forcément positif pour que y puisse atteindre y_{eq} . τ englobe d'une part la période d'incubation pour définir le retard à la transformation, et d'autre part étant donné qu'il est fonction de la température T il entraînera les effets de la vitesse de refroidissement sur les cinétiques *figure 5.6* (dans le cas du refroidissement).

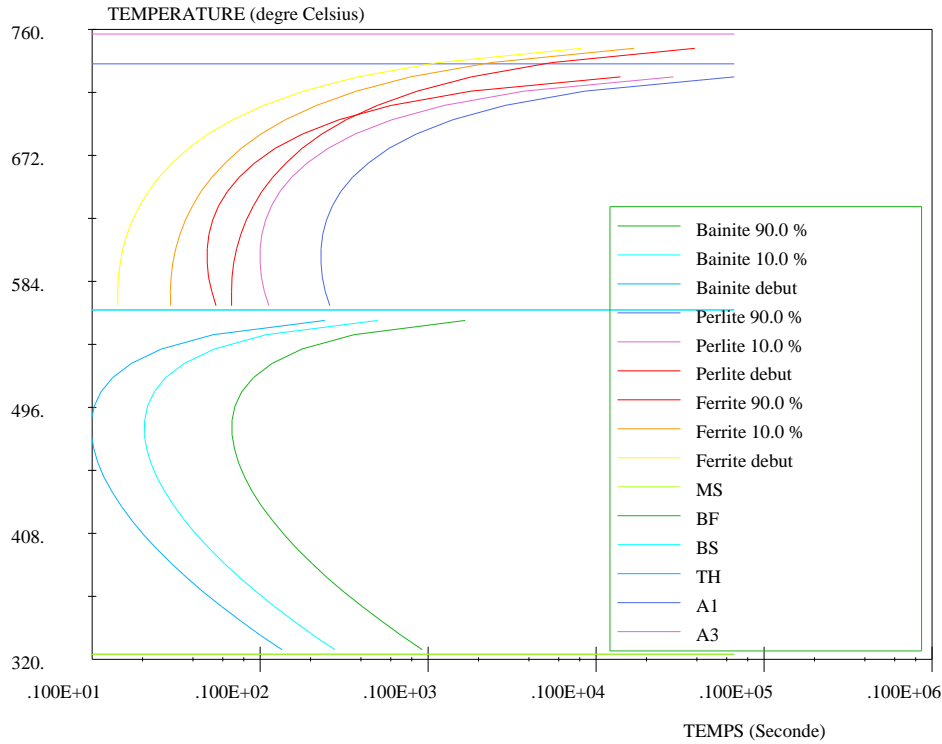


DIAGRAMME TEMPERATURE-TEMPS-TRANSFORMATION ACIER: 5140

 FIG. 5.5 – Diagramme TTT calculé par le modèle [Kirkaldy et al.90] pour l'acier 5140: 0.42 C, 0.68 Mn, 0.16 Si, 0.93 Cr, $G = 7$.

remarque: à température constante T , y tend vers y_{eq} avec un temps caractéristique $\tau(T)$ constant. En condition anisotherme, τ peut être calculé par exemple en identifiant le déplacement des températures caractéristiques [Leblond et al.84]. Pour la température de l'eutectoïde A_1 on obtient:

$$A_1 \equiv AC_1(\dot{T} = 0) \quad \text{et} \quad AC_1(\dot{T}) = A_1 + \dot{T}\tau,$$

Un seul paramètre est utilisé dans cette approche pour décrire les cinétiques de transformations à la place de deux paramètres dans le cas des théories utilisant le formalisme d'Avrami. [Leblond et al.84] modifie la valeur de τ pour tenir compte de paramètres comme la taille de grain austénitique, mais on ne connaît pas de développement dans le but de prendre en compte les hétérogénéités chimiques comme les ségrégations en carbone.

On notera que ce formalisme se rapproche de l'équation de la forme différentielle d'Avrami. En effet en comparant les équations on obtient:

$$\frac{1}{\tau} = nb \left(\frac{1}{b} \ln \frac{y_{max}}{y_{max} - y} \right)^{\frac{n-1}{n}} \quad (5.17)$$

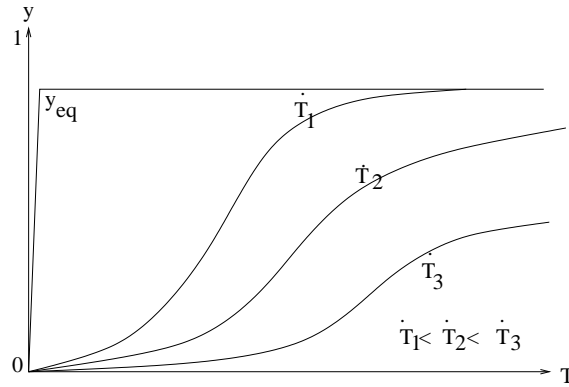


FIG. 5.6 – *Prédictions qualitatives du modèle de Leblond [Leblond et al.84], lorsque la vitesse de refroidissement est importante, un effet de ralentissement traduit la cinétique de transformation de phase.*

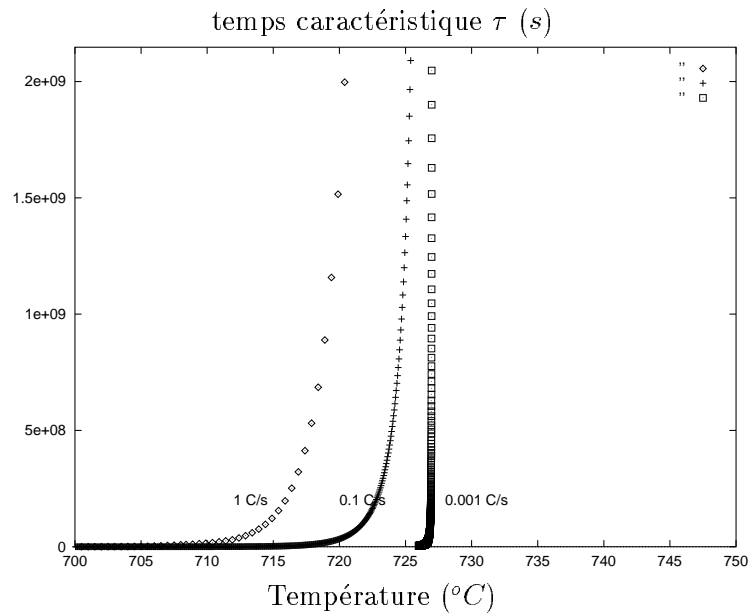


FIG. 5.7 – *Évolution du coefficient du modèle de Leblond en fonction de la température.*

Ainsi si on trace l'expression de droite de l'équation en fonction de la température *figure 5.7*, et pour différentes vitesses de refroidissement (1, 0,1 et 0,001°C/s), on comprend mieux le rôle joué par le temps caractéristique τ de [Leblond et al.84]; pour une faible vitesse de refroidissement, (τ) prend très rapidement une valeur presque infinie, on se rapproche de l'équilibre $\dot{y} \rightarrow 0$. De cette manière on aura toujours $y \simeq y_{eq}$. Lorsque la vitesse de refroidissement augmente, on s'écarte de l'équilibre et τ décroît plus lentement, de telle manière que $y \rightarrow y_{eq}$ avec une cinétique donnée \dot{y} .

2. Théories cinétiques de Waeckel

[Waeckel94] a développé une théorie cinétique de transformation de phase basée sur des données issues des diagrammes TRC. Pour ce modèle, le diagramme TRC définit un ensemble de chemins thermo-métallurgiques qui sont utilisés par le modèle pour déterminer les changements de phases en conditions anisothermes. Son objectif est de

définir un modèle dont le jeu de données est rapidement accessible par l'industriel. Il écrit pour la cinétique de transformation de phase les relations suivantes:

$$\dot{y} = f(p, \dot{p}, y, \eta) \quad \dot{\eta} = g(p, \dot{p}, y, \eta), \quad (5.18)$$

p est une variable d'état pilote comme la température, la contrainte ou la déformation, η représente d'autres variables d'état comme la taille de grain, ou la composition en carbone. Cette relation très générale n'est pas explicitement écrite, l'ensemble des données expérimentales issues des diagrammes TRC fournissent une série d'histoires thermo-métallo-mécaniques \mathcal{H}_k qui définissent des états \mathcal{E}_k tels que: $\dot{y}(\mathcal{E}_k) = f(\mathcal{E}_k)$. Ainsi pour un chemin quelconque thermo-métallo-mécanique donné \mathcal{E}_d , [Waeckel94] utilise des interpolations spéciales sur la base de données \mathcal{E}_k pour définir la cinétique de transformation sans jamais imposer une relation explicite à l'équation 5.18 décrivant la cinétique de transformation:

$$\dot{y}(\mathcal{E}_d) = f(\mathcal{E}_d) = \lambda_w f(\mathcal{E}_k), \quad (5.19)$$

λ_w sont les coordonnées de l'état \mathcal{E}_d dans l'espace des \mathcal{E}_k . En d'autres termes, l'ensemble des trajets expérimentaux \mathcal{E}_k contribuent, pour λ_w , à la définition du trajet donné \mathcal{E}_d .

Ce modèle a été modifié par [Martinez et al.99] pour prendre en compte l'effet de la taille de grain ainsi que la teneur en carbone. Dans l'équation 5.18, il remplace η par η_{eff} , η pouvant être la vitesse de refroidissement \dot{T} pour définir \dot{T}_{eff} :

$$\dot{T}_{eff} = \dot{T} \exp(a_1(c - c_0) + a_2(d - d_0)), \quad (5.20)$$

ce qui revient à traduire le TRC en fonction de la teneur en carbone c et de la taille de grain d , c_0 et d_0 correspondent à la teneur en carbone du TRC de base.

5.2.5 Transformations sans diffusion:

Pour les transformations de type martensitique, il n'y a pas d'ambiguïté, la plupart des auteurs utilisent la même relation. La formule de Koistinen et Marburger [Koistinen et al.59] donne la fraction transformée de martensite. Dans ce cas il n'y a pas vraiment de cinétique, c'est un écart vis à vis de la température de transformation M_s qui détermine la fraction transformée.

$$y_i = y_{i,\gamma} (1 - \exp(-A_M(M_s - T))) \quad (5.21)$$

$y_{i,\gamma}$ est la fraction d'austénite γ restante, M_s est la température de début de transformation martensitique, A_M est un paramètre dépendant du type d'acier. Ces coefficients pouvant dépendre de la teneur en carbone ou des contraintes.

5.2.6 Quel modèle de transformation doit-on choisir?

Se pose alors le problème du choix du modèle d'évolution ou plus indirectement de l'origine des données à utiliser. En effet plusieurs approches sont possibles. Les approches

de [Leblond et al.84], et [Waeckel94] avec des données issues de diagramme TRC, pourront permettre une description précise pour une gamme de refroidissement proche de celle ayant servi à l'identification des paramètres de la loi cinétique. L'approche de [Fernandes85] utilise des données issues de diagrammes TTT, et qui ne dépendent pas d'un chemin thermique particulier. Ceci permettra de simuler une large gamme d'histoires thermiques, tout en intégrant les aspects anisothermes [Denis97].

D'autre part, notre objectif est d'intégrer dans les lois de cinétique de transformation de phase l'influence des paramètres externes telle que l'influence des contraintes, ou l'influence des hétérogénéités en carbone. C'est en général les approches basées sur l'additivité qui sont utilisées pour tenir compte des couplages avec les hétérogénéités, les contraintes voire la taille de grain. Le modèle de [Fernandes85] a été étendu d'une part par [Denis87] pour prendre en compte les effets des contraintes internes, et d'autre part par [Mey97] pour prendre en compte l'influence des hétérogénéités en carbone dans le cadre de la cémentation. C'est pourquoi nous avons utilisé dans notre étude et en partenariat avec le LSG2M le modèle développé par [Fernandes85]. Dans l'avenir il sera intéressant d'étudier les modèles basés sur les concepts de germination et croissance [Badeshia92] [Suehori et al.92] [Saito et al.92] dès que leur modélisation pourra s'étendre à des systèmes plus complexes.

5.3 Description du modèle de transformation de phase choisi

Le modèle développé par [Fernandes85] au LSG2M est basé sur l'additivité qui permet de déterminer les cinétiques de transformations de phases au cours du refroidissement, à partir des cinétiques de transformations en conditions isothermes.

La transformation démarre lorsque la somme des quantités $\frac{\Delta t_i}{\tau(T_i)}$ devient égale à 1 (période d'incubation); Δt_i est le temps passé à la température T_i et $\tau(T_i)$ est le temps de début de la transformation à la température T_i déterminée à partir du diagramme TTT:

$$f \frac{\Delta t_i}{\tau(T_i)} = 1, \quad (5.22)$$

f est un facteur d'hérédité permettant de corriger la somme de Scheil dans le cas où l'additivité n'est pas respectée. Généralement pour le passage entre l'incubation dans le domaine ferrito-perlitique vers le domaine bainitique

Les cinétiques de transformations isothermes sont décrites par une loi de Johnson-Mehl-Avrami:

$$y = y_{max}(1 - \exp(-bt^n)). \quad (5.23)$$

Le calcul de la fraction transformée y_{i+1} au palier $i + 1$ se fait à partir du principe d'additivité et du temps fictif de Pumphrey et Jones [Pumphrey et al.48] (comme illustré sur la *figure 5.8*):

Le refroidissement est schématiquement réalisé en deux étapes pour les températures T_i et T_{i+1} pour des temps respectifs Δt_i et Δt_{i+1} . Pour ces deux paliers isothermes définis

par la température et le temps, l'équation d'Avrami permet de calculer leur cinétique de croissance isotherme. Notre objectif est de calculer la cinétique de croissance anisotherme de la température T_i à la température T_{i+1} . Pour le premier palier à T_i , y_i est calculée avec une cinétique isotherme (on applique 5.23):

$$y_i = y_{i,max}(1 - \exp(-b_i \Delta t_i)^{n_i})). \quad (5.24)$$

Pour le deuxième palier à T_{i+1} , on suppose un temps fictif t_{i+1}^* comme le temps nécessaire pour obtenir la fraction y_i avec les cinétiques de croissance du palier $i + 1$:

$$t_{i+1}^* = \left[\frac{-\ln(1 - \frac{y_i}{y_{i,max}})^{\frac{1}{n_{i+1}}}}{b_{i+1}} \right], \quad (5.25)$$

y_{i+1} est calculée avec une cinétique isotherme (on applique 5.23) au temps fictif $t_{i+1}^* + \Delta t_{i+1}$:

$$y_{i+1} = y_{i,max}(1 - \exp(-b_{i+1}(t_{i+1}^* + \Delta t_{i+1})^{n_{i+1}})). \quad (5.26)$$

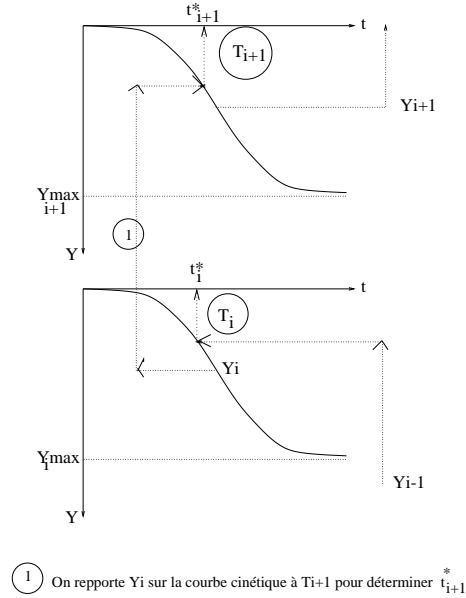


FIG. 5.8 – Détermination du temps t^* fictif [Pumphrey et al.48]

La figure 5.9 donne une représentation schématique du diagramme TTT tel qu'il est utilisé dans le modèle de transformations de phases. Le diagramme est décomposé en différents domaines de transformation séparés par les températures caractéristiques de l'acier:

- $A_3 - A_1$: domaine de formation de la ferrite proeutectoïde seule.
- $A_1 - TH$: domaine de formation de la ferrite et de la perlite (TH température d'Hultgren).
- $TH - B_s$: domaine de formation de la perlite seule.

- $B_S - M_s$: domaine de formation de la bainite. Dans le domaine $B_s - B_f$, la transformation bainitique peut être considérée comme incomplète.
- $M_s -$: domaine de formation de la martensite.

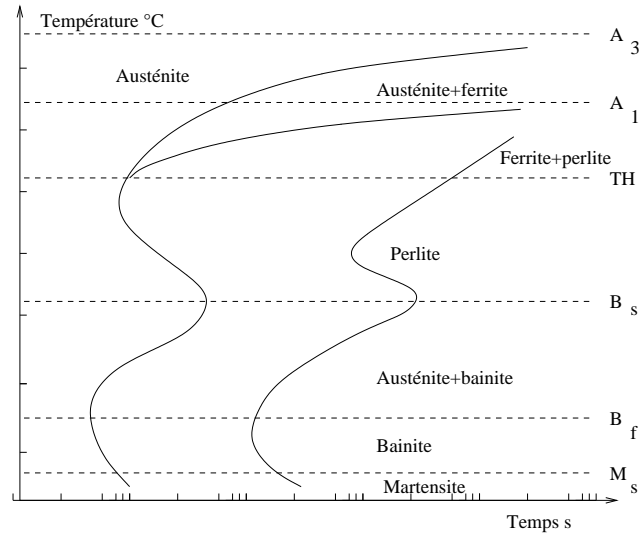


FIG. 5.9 – Représentation schématisée d'un diagramme TTT pour le modèle de transformation de phase [Fernandes85].

5.3.1 Exemple d'application du modèle de transformation de phase

L'exemple que nous proposons a été présenté par [Fernandes85]. Il s'agit d'un acier 42CD4 classique pour le traitement thermique. Cet exemple est intéressant car cet alliage présente l'ensemble des transformations de phase: ferrite, perlite, bainite, martensite. Le diagramme TTT de cet acier déterminé expérimentalement par [Fernandes85] pour la simulation est représenté sur la figure 5.10.

La figure 5.11 montre le diagramme TRC recalculé par le modèle du LSG2M que nous avons implémenté dans Forge. Ce qui est intéressant, c'est d'observer le passage du diagramme TTT au diagramme TRC, qui montre la faisabilité du modèle pour décrire la totalité du domaine de transformation en condition anisotherme. Nous renvoyons le lecteur aux travaux de [Fernandes85] pour une confrontation précise du modèle aux résultats expérimentaux.

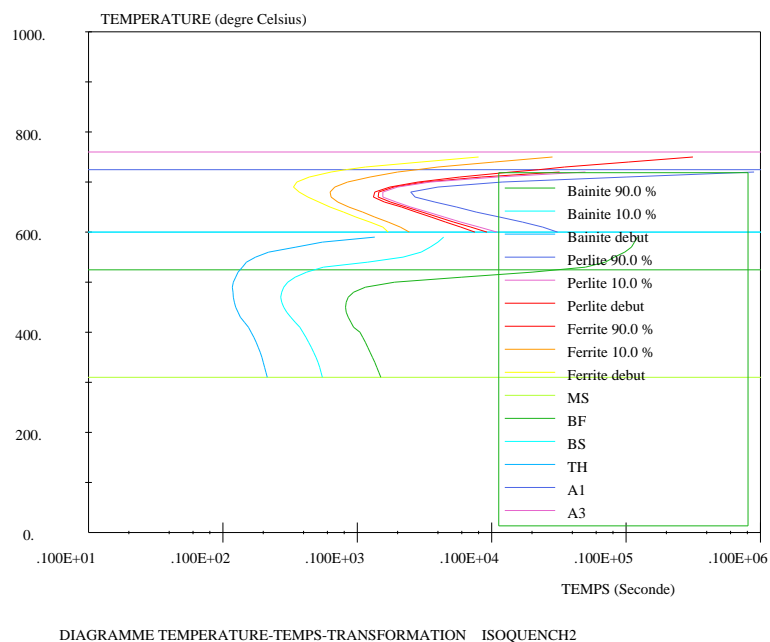


FIG. 5.10 – Diagrammes *TTT* d'un acier 42CD4 , données expérimentales [Fernandes85].

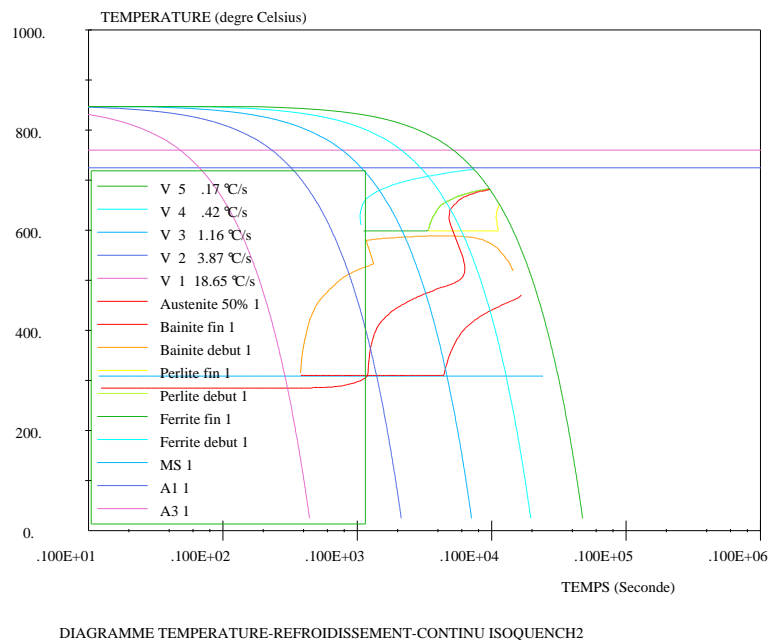


FIG. 5.11 – Diagrammes *TRC* d'un acier 42CD4 retracé à l'aide du logiciel Forge à partir du modèle de transformation de phase.

5.4 Prise en compte des hétérogénéités en carbone

Les pièces traitées sont souvent hétérogènes en éléments d'alliages. Dans cette étude nous avons pris en compte seulement l'hétérogénéité en carbone. Notre objectif est de calculer les transformations de phase d'une pièce dont l'hétérogénéité est, soit issue d'une ségrégation de coulée de fonderie, soit issue d'un traitement thermochimique comme la cémentation. Dans les deux cas l'échelle étudiée est la macro-ségrégation.

Lors du refroidissement le gradient de carbone relatif aux ségrégations affecte les cinétiques de transformation de phase. L'approche utilisée par [Mey97] a pour but de calculer un nouveau diagramme TTT pour chaque composition à partir du TTT de référence correspondant à la nuance de l'acier. Cette approche est basée sur un *décalage* théorique des diagrammes TTT en fonction du carbone. D'autres auteurs comme [Dowling et al.97], [Wang et al.99] utilisent plusieurs diagrammes TTT afin de calculer toutes les cinétiques de transformation correspondant à la variation de carbone dans la pièce. Cette dernière approche est fastidieuse et oblige à interpoler les données obtenues à partir de plusieurs diagrammes TTT.

5.4.1 Modèle de modifications des diagrammes TTT avec la teneur en carbone

Le modèle [Mey97][Denis et al.99] suppose que le diagramme TTT de l'acier de base (i.e acier correspondant à la plus faible teneur en carbone de la pièce) est connu, et il a établi des lois d'évolution qui permettent de déduire ces diagrammes pour une teneur en carbone différente (toujours supérieure à la teneur de base). On détermine ainsi successivement:

1. les variations avec la teneur en carbone des températures caractéristiques des diagrammes (A_3 , A_1 , TH , B_s , M_s).
2. l'effet de la teneur en carbone sur les cinétiques isothermes.
3. l'effet de la teneur en carbone sur les valeurs des y_{max} de chaque phase (règle du bras de levier ou des segments inverses).

5.4.1.1 Variations des températures caractéristiques avec la teneur en carbone

L'évolution des températures caractéristiques en fonction de la composition est obtenue soit à partir de calculs thermodynamiques des diagrammes d'équilibre soit à partir d'analyses statistiques de données expérimentales. A partir de ces relations [Mey97] définit la variation de température induite par une variation de carbone $\Delta c = c - c_0$, où c_0 correspond à la teneur en carbone de la nuance de base.

– **Température A_3 :**

$$\Delta A_3 = (-370 + 16.2Mn + 32.3Si + 15.4Cr + 48Ni)(c - c_0) + 174(c^2 - c_0^2). \quad (5.27)$$

– **Température A_1 :**

A_1 varie peu avec la teneur en carbone, la variation est pour l'instant nulle, et n'est pas prise en compte dans le modèle.

– **Température TH :**

La température TH est obtenue par l'extrapolation d'Hultgren. Si on suppose une extrapolation linéaire de la ligne A_{cm} , on obtient:

$$\Delta TH = \frac{A_1 - TH_0}{c_e - c_0}(c - c_0), \quad (5.28)$$

où c_e correspond à la teneur en carbone de l'eutectoïde de la nuance. Une autre expression phénoménologique de la variation de TH basée sur des mesures expérimentales peut être utilisée:

$$\Delta TH = K(c - c_0), \quad (5.29)$$

$$K = -523.$$

– **Température B_s :**

$$\Delta B_s = -270(c - c_0) \quad (5.30)$$

– **Température M_s :**

$$\Delta M_s = (-452.8 - 71.44Mn - 67.62Cr)(c - c_0) + 216(c^2 - c_0^2). \quad (5.31)$$

5.4.1.2 Variations des cinétiques isothermes avec la teneur en carbone

Le déplacement d'une courbe TTT (*cf figure 5.9*) en fonction de la teneur en carbone est défini de la manière suivante:

$$D_k = \frac{t - t_0}{t_0}, \quad (5.32)$$

où t correspond au temps de la courbe de transformation isotherme de la phase k de l'acier ayant une teneur en carbone c , et t_0 à celui de l'acier de base de teneur en carbone c_0 . Pour chaque phase ce déplacement est obtenu à partir des travaux de [Kirkaldy et al.90]. En effet le modèle de [Kirkaldy et al.90] comme nous l'avons déjà vu (*cf § 5*), permet de définir les temps de transformation à partir de la composition de l'alliage, de la taille de grain et de la température. A partir de ce modèle et en appliquant la formule 5.32, il est possible d'exprimer le déplacement des courbes TTT pour chaque phase:

$$\begin{aligned}
 D_f &= \left(\frac{A_3^0 - T}{A_3 - T} \right)^3 - 1, \\
 D_p &= \left(\frac{A_1^0 - T}{A_1 - T} \right)^3 - 1, \\
 D_b &= \left(\frac{B_s^0 - T}{B_s - T} \right)^2 \frac{(2.34 + 10.1C + 3.8Cr + 19Mo) \int_0^y \frac{f_1(x)dx}{x^{\frac{2(1-x)}{3}} (1-x)^{\frac{2x}{3}}} }{(2.34 + 10.1C_0 + 3.8Cr + 19Mo) \int_0^y \frac{f_2(x)dx}{x^{\frac{2(1-x)}{3}} (1-x)^{\frac{2x}{3}}} } - 1, \\
 f_1(x) &= \exp[x^2(1.9C + 2.5Mn + 0.9Ni + 1.7Cr + 4Mo - 2.6)], \\
 f_2(x) &= \exp[x^2(1.9C_0 + 2.5Mn + 0.9Ni + 1.7Cr + 4Mo - 2.6)],
 \end{aligned} \tag{5.33}$$

où D_f est le déplacement de la ferrite, D_p est le déplacement de la perlite, D_b est le déplacement de la bainite. Pour la bainite, le déplacement est plus complexe en raison de la non-linéarité du déplacement avec le carbone, le déplacement évolue avec le taux de transformation. Pour la ferrite et la perlite, quelque soit le taux de transformation le déplacement est constant pour une température donnée.

Le déplacement sur le domaine martensitique se fait en prenant en compte la variation de M_s avec la teneur en carbone.

La démarche [Mey97] pour le déplacement des courbes avec le carbone, pourrait se généraliser aux autres éléments d'alliages, ou bien à la taille de grain. Ceci permettrait de traiter un calcul de trempe en intégrant toutes les ségrégations issues du procédé de fonderie par exemple.

De manière synthétique, on notera $D_{k,j}$ le déplacement de la phase k pour un taux de transformation; début $j = 1$, 10% $j = 2$, 90% $j = 3$:

$j = 1$: début de la transformation de la phase k ;
 $j = 2$: 10% de transformation de la phase k ;
 $j = 3$: 90% de transformation de la phase k ;

Le déplacement $D_{k,j}$ intervient dans le calcul des coefficients cinétiques n_k et b_k de la loi de Johnson-Mehl-Avrami pour tenir compte de la variation en carbone. Pour un acier à teneur en carbone différente de la nuance de base, ces coefficients sont exprimés de la manière suivante (dans le cas où les valeurs à 10% et 90% sont prises comme références):

$$\begin{aligned}
 n_k &= \frac{A}{\frac{A}{n_k^0} + \ln\left(\frac{1+D_{k,2}}{1+D_{k,3}}\right)} \quad \text{avec} \quad A = \ln\left(\frac{\ln 0.9}{\ln 0.1}\right), \\
 b_k &= \frac{B}{\left(\frac{B}{b_k^0}\right)^{\frac{n_k}{n_k^0}} (1 + D_{k,2})^{n_k}} \quad \text{avec} \quad B = \ln(0.9),
 \end{aligned} \tag{5.34}$$

n_k^0 et b_k^0 sont les coefficients pour la teneur en carbone de référence c_0 .

A partir des nouvelles expressions des coefficients d'Avrami, il est possible de calculer un diagramme TTT d'un acier ayant une teneur en carbone c ($c > c_0$) à partir du diagramme TTT de l'acier de base avec une teneur initiale en carbone c_0 qui servira de référence.

5.4.1.3 Variations des taux de phase maximum avec la teneur en carbone

Pour définir complètement une cinétique pour une teneur en carbone c , il nous reste à définir l'évolution des fractions transformées maximales $y_{max}(T)$ avec la teneur en carbone. La méthode retenue par [Mey97] est de définir les nouvelles fractions maximales à partir du diagramme d'équilibre de l'acier et de la variation du carbone. La méthode employée est la méthode du bras de levier, on obtient ainsi pour la ferrite proeutectoïde:

$$y_{max,f}(T) = 1 - \left(\frac{c - c_\alpha(T)}{c_0 - c_\alpha(T)} \right) (1 - y_{max,f}^0(T)) \quad (5.35)$$

où $y_{max,f}^0(T)$ est la fraction maximale de ferrite obtenue pour la teneur en carbone de base c_0 à la température T , c_α est la solubilité en carbone dans la ferrite à la température T . La valeur de c_α peut être obtenue simplement en utilisant une variation linéaire au dessus de A_1 et une valeur constante en dessous:

$$T > A_1 \quad \text{alors} \quad c_\alpha = \frac{912 - T}{8486}, \quad (5.36)$$

$$T < A_1 \quad \text{alors} \quad c_\alpha = 0.022.$$

Pour obtenir le taux de perlite $y_{max,p}(T)$, il suffit de faire la somme des deux phases:

$$y_{max,f}(T) + y_{max,p}(T) = 1, \quad \forall T > B_s. \quad (5.37)$$

5.4.1.4 Variations de la dureté avec la teneur en carbone

Le calcul de dureté est associé au modèle métallurgique de [Fernandes85]. La dureté finale H_v résulte de l'accumulation des contributions de dureté des constituants formés tout au long du refroidissement:

$$H_v = \sum_{\Delta t_i} \left(\sum_k \Delta y_{k,i} H_{v_{k,i}} \right), \quad (5.38)$$

où $\Delta y_{k,i}$ est l'incrément de constituant k au pas de temps Δt_i , et $H_{v_{k,i}}$ est la micro-dureté du constituant k qui dépend de la température de formation à l'incrément Δt_i . Pour la bainite et la martensite, les micro-dureté sont fonctions de la teneur en carbone, selon les formules suivantes [Fernandes85], [Mey97]:

$$H_v^m = 147 + 2333C - 2352C^2 + 816C^3, \quad H_v^b = H_{v0} + \eta(c - c_0), \quad (5.39)$$

η est une constante, et H_{v0} la dureté de la bainite formée à la température T pour la teneur en carbone de référence c_0 .

5.4.2 Exemple d'application de décalage d'un TTT avec la teneur en carbone

Pour valider l'implémentation du modèle de transformation de phase [Fernandes85],[Mey97] dans Forge, nous avons utilisé différents tests mis au point au LSG2M. L'acier choisi est un acier fictif dont la teneur en carbone initiale est de $0.2\%C$.

– Cinétiques de transformations isothermes

Nous présentons ici la simulation d'un décalage d'un diagramme TTT avec la teneur en carbone. A partir d'une nuance de base à $0.2C$ on calcule successivement les nouveaux diagrammes TTT pour $0.4C$ et $0.6C$. Les résultats sont montrés sur les *figure 5.12*.

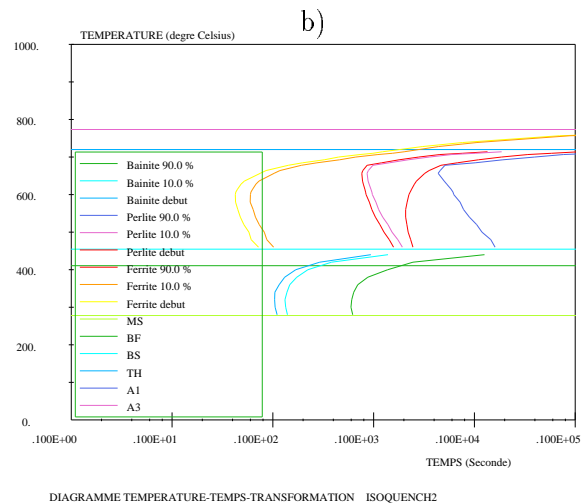
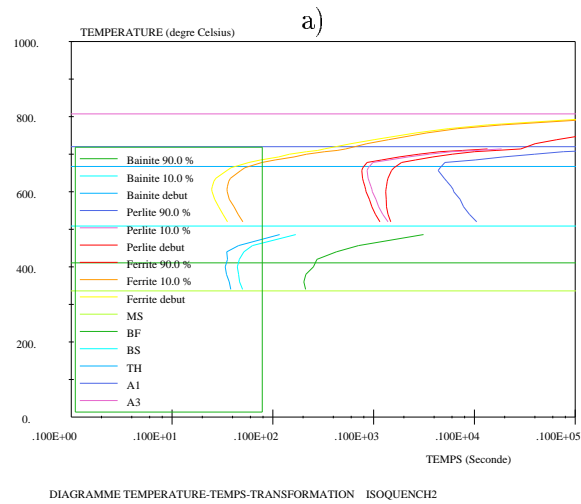
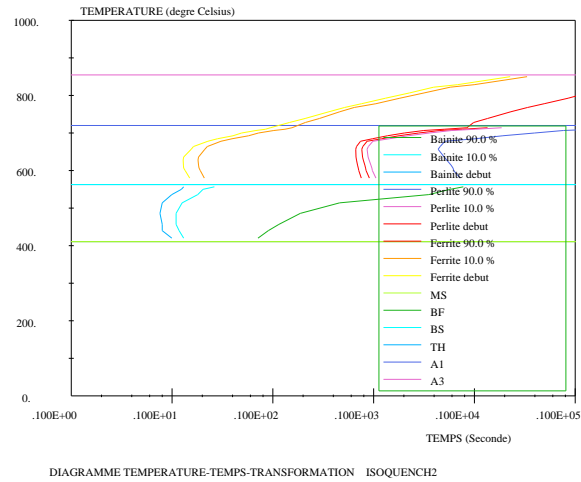
Nous notons sur cette figure, une bonne prise en compte de l'abaissement des températures caractéristiques avec la teneur en carbone. On observe le décalage des courbes de transformation pour la ferrite et la bainite, au début, et à 10%, et 90%. Le domaine ferritique a tendance à disparaître lorsque la teneur en carbone augmente, et la position du domaine perlitique n'est pas affectée par la teneur en carbone (conformément aux hypothèses du modèle).

– Cinétiques de transformations anisothermes

On simule le refroidissement imposé d'une éprouvette sans gradient thermique et chimique. L'éprouvette a un diamètre de 4 mm et on impose un refroidissement de $10^{\circ}C/s$. La pièce est homogène en carbone et contient successivement $0.2\%C$, $0.4\%C$, et $0.6\%C$. Comme dans l'exemple précédent, le diagramme TTT est donné pour $0.2\%C$, pour les autres nuances, le diagramme est recalculé par le modèle. Les comparaisons avec les résultats obtenus avec Quest² sont montrées sur les *figures 5.13*. Les courbes obtenues par les deux codes sont superposées, le maximum de différence est de 0.05%, et correspond à l'erreur numérique de l'intégration du déplacement de la bainite à partir de l'équation 5.33.

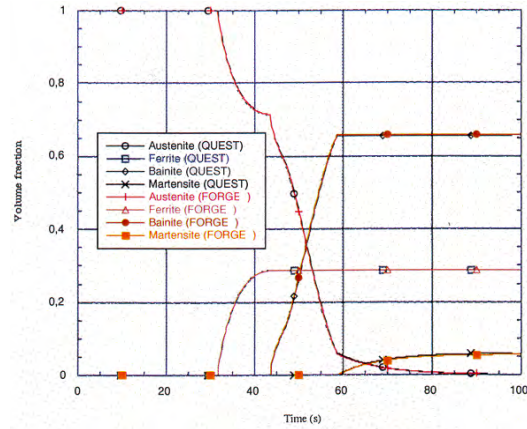
Le code Forge avec le modèle de transformation de phase, permettra de prendre en compte les hétérogénéités de la pièce et plus particulièrement la variation de la teneur en carbone. Le couplage avec la teneur en carbone se fera automatiquement par un calcul du décalage en température et en temps du diagramme TTT en chaque point, sans avoir besoin de données supplémentaires.

2. Quest est le logiciel du LSG2M (Ecole des Mines de Nancy).

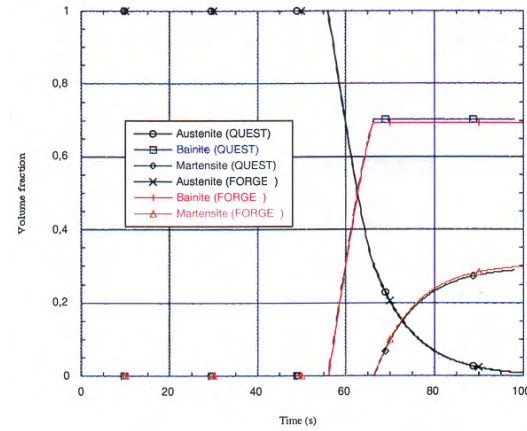


c)

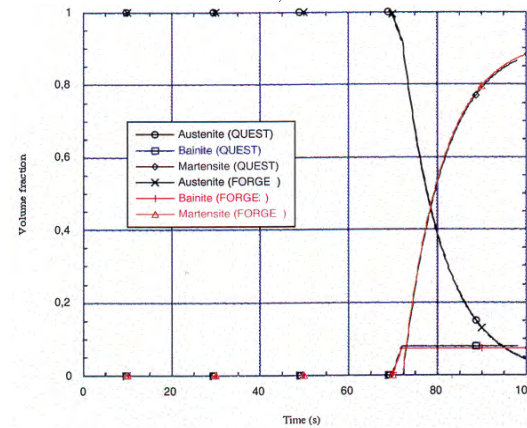
FIG. 5.12 – Exemple de calcul de décalage du diagramme TTT avec la teneur en carbone, a) TTT de la teneur de base 0.2c, b) TTT recalculé 0.4c, c) TTT recalculé 0.6c.



a)



b)



c)

FIG. 5.13 – Comparaisons Quest/Forge dans le cas d'une éprouvette sans gradient) 0.2%C, b) 0.4%C, c) 0.6%C.

5.5 Prise en compte des contraintes et des déformations

Lorsqu'on s'intéresse aux transformations de phase d'une pièce massive, où le gradient thermique est important, les calculs des cinétiques doivent prendre en compte non seulement l'effet des contraintes internes, mais aussi des déformations de la pièce. L'influence de l'état de contraintes et des déformations se traduit par un décalage des courbes de transformations TTT (ou TRC) vers des temps en général plus courts, et par une augmentation des vitesses de transformations. Nous avons adopté le modèle développé par [Denis87], qui comme pour la prise en compte du carbone, se traduit par le calcul d'un facteur de décalage des courbes de transformations du diagramme TTT. Le déplacement d'une courbe TTT (*cf figure 5.9*) en fonction des contraintes est défini de la manière suivante:

$$D_\sigma = \frac{t_\sigma - t_0}{t_0}, \quad (5.40)$$

où t_σ correspond au temps de la courbe de transformation sous contrainte, et t_0 à celui de la courbe de transformation sans contrainte (typiquement une éprouvette sans gradient comme celles utilisées pour les courbes dilatométriques). On notera que le temps t_0 peut être un temps de transformation déjà recalculé, par le modèle par rapport à la nuance de base, pour un calcul de la prise en compte du carbone par exemple. Ainsi les nouveaux coefficients d'Avrami sous contrainte sont définis de la manière suivante:

$$n_\sigma = n, \quad (5.41)$$

$$b_\sigma = \frac{b}{(1 + D_\sigma)^n}, \quad \text{avec } D = f(\sigma_{eq}).$$

La fonction $f(\sigma_{eq})$ est prise comme un polynôme de σ_{eq} [Denis87].

Prenons l'exemple de la transformation perlitique d'un acier XC80. Le diagramme TRC après calcul par le modèle est montré sur la *figure 5.14a*). Le même diagramme TTT sous contrainte de traction de $\sigma_{eq} = 100 \text{ MPa}$ provoque un décalage du diagramme vers les temps plus courts comme le montre la *figure 5.14b*). Dans ce cas la fonction $f(\sigma_{eq})$ est:

$$f(\sigma_{eq}) = C\sigma_{eq} \quad \text{avec } C = 8.510^{-3} \text{ MPa}^{-1}. \quad (5.42)$$

Dans le cas d'un calcul thermo-métallo-mécanique, le modèle devra intégrer tout le passé thermo-mécanique pour recalculer en chaque point et en chaque instant la cinétique de transformation dépendante de l'histoire du matériau.

Pour la transformation martensitique, l'influence de la contrainte est traduite par la dépendance avec la contrainte équivalente σ_{eq} et la pression p de la température martensitique M_s suivant la formule [Denis87]:

$$M_s = M_s^0 + A\sigma_{eq} + Bp, \quad (5.43)$$

où M_s^0 est la température martensitique statique (sans contrainte).

Pour ce modèle, il est supposé que l'effet des déformations plastiques au cours du refroidissement est négligeable par rapport à l'effet des contraintes internes [Denis87]. L'effet

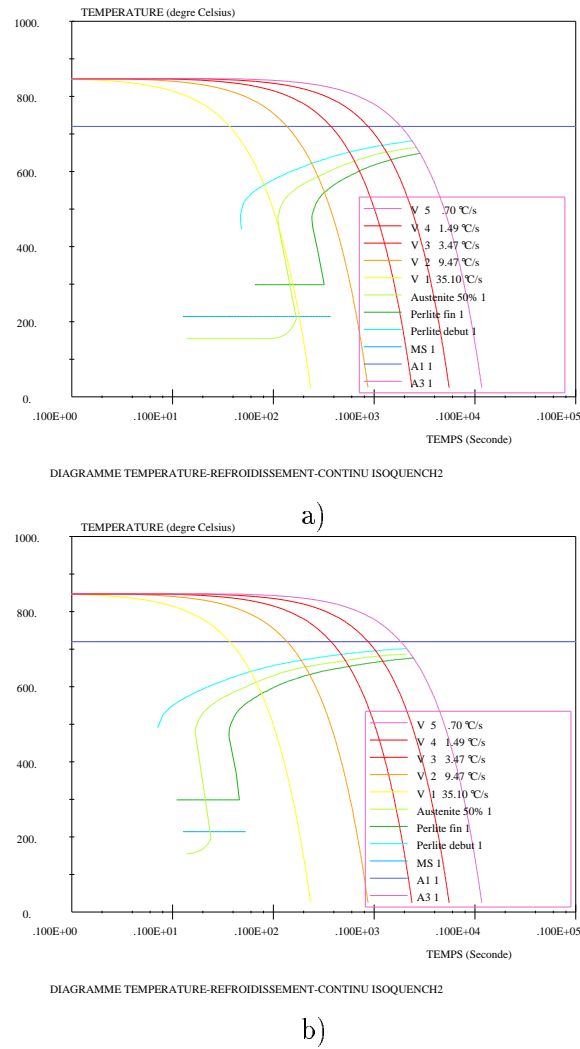


FIG. 5.14 – Exemple de calcul de décalage du diagramme TRC sous contrainte, a) TRC recalculé sans contrainte, b) TRC recalculé sous contrainte équivalente de 100 MPa.

d'une prédéformation (étape de forgeage) n'est actuellement pas prise en compte. En effet, la déformation à chaud entraîne une augmentation du nombre de sites de germination par la présence de nombreux défauts dans la structure [Umemoto83]. Sa prise en compte sur les cinétiques de transformation de phase nécessiterait une approche plus locale.

5.6 Conclusion

L'implémentation du modèle de transformation de phase du LSG2M dans Forge permet de prendre en compte les couplages métallurgie-thermique, métallurgie-mécanique et carbone-métallurgie. Il nous permettra de calculer les cinétiques de transformation de phase en tenant compte du passé thermo-mécanique ainsi que de la composition locale. Il nous reste à définir les couplages *inverses*, c'est à dire, comment les transformations de phase modifient la loi de comportement mécanique ainsi que le champ de température.

Bibliographie

- [Badeshia92] Badeshia (H.KD.H). – Modelling of steels welds. *Mat. Sci. and Techn.*, 1992, pp. p123–133.
- [Billon87] Billon (N.). – *Modélisation des cinétiques globales de cristallisation des polymères. Application aux procédés de mise en forme.* – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1987.
- [Colonna et al.92] Colonna (F.), Massoni (E.), Denis (S.), Chenot (J-L.), Wendenbaum (J.) et Gauthier (E.). – On thermo-elastic-viscoplastic analysis of cooling processes including phases changes. *Journal of Materials Processing Technology*, n° 34, 1992, pp. 525–532.
- [Denis et al.86] Denis (S.), Baiso (C.), Fernandes (F.M.B) et Simon (A.). – Contributions des contraintes internes d'origine thermique dans le calcul de l'avancement des transformations de phases en refroidissement continu d'un acier xc80. *Mémoires et Etudes Scientifiques*, Octobre 1986, pp. 553–541.
- [Denis et al.99] Denis (S.), Archambault (P.), Aubry (C.), Mey (A.), Louin (J.C) et Simon (A.). – Modelling of phase transformation kinetics and coupling with heat treatment residual stress predictions. *J. Phys. IV France* 9, 1999, pp. 323–332.
- [Denis87] Denis (S.). – *Modélisation des interactions contrainte-transformation de phase et calcul par élément finis de la genèse des contraintes internes au cours de la trempe des aciers.* – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1987.
- [Denis97] Denis (S.). – Préviation des contraintes résiduelles induites par traitement thermique et thermochimique. *La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des matériaux*, février 1997, pp. 157–176.
- [Dowling et al.97] Dowling (W.), Pattok (T.), Fergusson (B.L.), Schick (D.), Helen (Y.) et Howes (M.). – Development of a carburising and quenching simulation tool: program overview. *Heat Treatment of Metal*, janvier 1997, pp. 1–6.
- [Fernandes85] Fernandes (F.M.). – *Modélisation et calcul de l'évolution de la température et de la microstructure au cours du refroidissement des aciers.* – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1985.
- [Habraken89] Habraken (A-M.). – *Contribution à la modélisation du formage des métaux par la méthode des éléments finis.* – Thèse de doctorat, Université de Liège, 1989.
- [Hamata95] Hamata (N.). – *Modélisation du couplage entre l'élasto-viscoplasticité anisotherme et la transformation de phase d'une fonte G.S. ferritique.* – Thèse de doctorat, Université de Paris VI, 1995.
- [Inoue et al.92] Inoue (T.), Ju (D.Y) et Arimoto (K). – Metallo-thermo-mechanical simulation of quenching process. theory and implementation of computer code 'hearts'. *Proceeding of the first international conference on quenching and control of distortion, Chicago, Illinois, USA*, septembre 1992.
- [Johnson et al.39] Johnson (W.A) et Mehl (R.F). – *trans AIME*, vol. 135, 1939, p. 416.

-
- [Kirkaldy et al.90] Kirkaldy (J.S.) et Burchmays (B.). – Modeling of temperature field, transformation behavior hardness and mechanical response of low alloys steel during cooling from the austenite region. *Journal heat treatment*, vol. 8, 1990, pp. 127–136.
- [Koistinen et al.59] Koistinen et Marburger. – A general equation prescribing extent of the austenite-martensite transformation in pure $fe - c$ alloys and plain carbon steels. *Acta metallurgica*, vol. 7, 1959, pp. 59–60.
- [Leblond et al.84] Leblond (J.B.) et Devaux (J.). – A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size. *Acta metallurgica*, vol. 32, n° 1, 1984, pp. 134–146.
- [Mainier et al.78] Mainier (Ph), Jungmann (B.) et Dollet (J.). – *Creusot-Loire System for the Prediction of the Mechanical Properties of Low Alloy Steel Products*. – D.V. Doanne and Kirkhaldy, 1978, *aime*, warrendale pa édition, *Hardenability Concepts with Applications to Steel*.
- [Martinez et al.99] Martinez (M.), Burlet (H.) et Briottet (L.). – Modèle de transformation de phases dans les aciers avec prise en compte de la taille de grain austénitique et de la décarburation. *Colloque National Mecamat Aussois*, Janvier 1999, pp. 214–217.
- [Mey97] Mey (A.). – *Prévision par calcul des cinétiques de transformations de phases et des contraintes internes lors du traitement thermique d'aciers cémentés*. – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, Septembre 1997.
- [Pumphrey et al.48] Pumphrey (W.I.) et Jones (F.W.). – -. *JISI*, vol. 159, 1948, p. 137.
- [Reti et al.99] Reti (T.), Fried (Z.) et Felde (I.). – Muti-phase modeling of austenite transformation processes during quenching. *The 3rd International Conference On Quenching And control Of Distortion*, March 1999, pp. 157–172.
- [Saito et al.92] Saito (Y.) et Shiga (C.). – Computer simulation of microstructural evolution in thermo-mechanical processing of steels plates. *ISIJ Int.*, vol. 32, n° 3, 414–422 1992.
- [Suehori et al.92] Suehori (M.), Senuma (T.), Yada (H.) et Sato (K.). – Application of mathematical model for predicting microstructural evolution to high carbon steels. *ISIJ Int.*, vol. 32, n° 3, 1992, pp. 433–439.
- [Umemoto83] Umemoto (M.). – Transformation to pearlite from work-hardened austenite. *Trans. ISIJ*, vol. 23, 1983, p. 775.
- [Waeckel94] Waeckel (F.). – Modélisation du comportement thermo-métallurgique des aciers. *J. de Physique*, vol. C3, n° 4, 1994, pp. 221–232.
- [Wang et al.99] Wang (J.), van der Wolk (P.J) et van der Zwaag (S.). – Effects of carbon concentration and cooling rate on continuous cooling transformations predicted by artificial neural network. *ISIJ International*, vol. 39, n° 10, 1999, pp. 1038–1046.
-

Chapitre 6

Couplage loi de comportement et transformation de phase

Sommaire

6.1	Couplage mécanique-métallurgie	132
6.1.1	Plasticité de transformation:	132
6.1.2	Sources de déformations liées aux transformations de phase . . .	133
6.1.3	Déformation par changement de phase	133
6.1.4	Modèle d'homogénéisation	134
6.1.5	Écrouissage de chaque phase	136
6.1.6	Modification de la loi de comportement	137
6.2	Couplage thermique-métallurgie	138
6.2.1	Méthode en capacité et conductivité équivalente	138
6.2.2	Méthode du terme source	139
6.3	Couplage thermo-métallo-mécanique	140
6.3.1	Algorithme de couplage thermo-métallurgique	140
6.3.2	Algorithme de couplage thermo-métallo-mécanique	142
6.4	Conclusion	142
	Bibliographie	143

6.1 Couplage mécanique-métallurgie

6.1.1 Plasticité de transformation:

6.1.1.1 Phénoménologie de la plasticité de transformation

D'un point de vue phénoménologique, on appelle *plasticité de transformation* la déformation *anormale* provoquée par l'application d'une contrainte sur un échantillon en cours de transformation. On constate expérimentalement qu'une éprouvette traitée thermiquement sous charge présente une déformation résiduelle importante, en plus du simple changement de volume associé à la transformation. Ce phénomène est observé pour les transformations avec ou sans diffusion [Gautier et al.87], et [Gautier et al.95]. Les modes de déformations pour les deux types de transformation sont différents:

- pour la transformation martensitique, la contrainte externe dirige les lattes martensitiques (*figure 6.1*) au cours de la transformation. L'orientation préférentielle crée une déformation macroscopique dans la direction de sollicitation. Sans contrainte, la somme des déformations microscopiques ne provoquerait pas à l'échelle macroscopique de déformation dirigée, mais une déformation isotrope.
- Pour la transformation avec diffusion, c'est également l'anisotropie engendrée par la contrainte externe qui, globalement, entraîne une déformation inélastique dans la direction de sollicitation. Sans contrainte, la déformation macroscopique serait toujours isotrope.

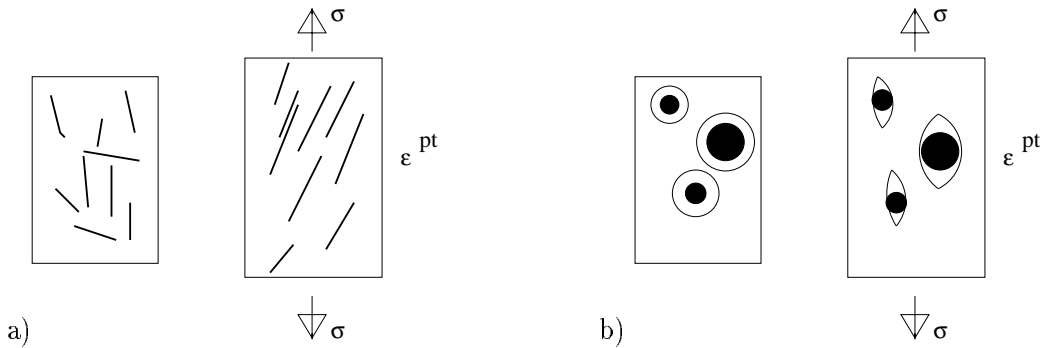


FIG. 6.1 – Représentation schématique de la plasticité de transformation, a) transformation martensitique, b) transformation avec diffusion [Gautier et al.89]

Des approches locales microscopiques ont essayé d'expliquer la plasticité de transformation. [Diani et al.92] utilise un schéma auto-cohérent élastoplastique, où la déformation inélastique (composante locale de la déformation par plasticité de transformation macroscopique) résulte de la plastification des systèmes de glissement de l'austénite et des plaquettes de martensite en formation ainsi que de la formation de nouvelles plaquettes de martensite. Ces modèles permettent de retrouver dans le cas de la transformation martensitique les résultats expérimentaux obtenus par [Gautier et al.95]. Cependant, il est difficile d'appliquer le même modèle dans le cas de transformation avec diffusion. Les approches locales sont prometteuses, mais la modélisation n'est pas à l'heure actuelle assez aboutie pour effectuer une simulation efficace dans un code de calcul basé sur les éléments finis.

L'approche macroscopique, moins rigoureuse mais plus réaliste (en terme de faisabilité), permet de modéliser le phénomène de plasticité de transformation sans faire référence aux phénomènes locaux responsables de la déformation. Greenwood et Johnson

[Greenwood et al.65] ont établi, en traction, une relation entre la plasticité de transformation ϵ^{pt} et la contrainte σ uni-axiale appliquée pour une transformation complète. En utilisant la théorie macroscopique de la plasticité, à l'échelle d'une inclusion dans une matrice, les auteurs aboutissent à la relation suivante:

$$\epsilon^{pt} = \frac{5}{6} \frac{\Delta V}{V} \frac{\sigma}{\sigma_\gamma} \quad (6.1)$$

où $\frac{\Delta V}{V}$ est l'expansion volumique due au changement de phase, σ_γ la limite d'écoulement de l'austénite. A partir de cette relation, un certain nombre d'auteurs ont développé d'autres approches, on retiendra la forme la plus abouti proposée par Giusti [Giusti81] qui a développé une formulation incrémentale adaptée au chargement multi-axial et faisant référence à l'état d'avancement de la réaction; la relation 6.1 devient alors tensorielle:

$$\epsilon_{ij}^{pt} = k s_{ij} f(y) \dot{y} \quad (6.2)$$

où s_{ij} est le déviateur des contraintes, $f(y)$ est une fonction du type de transformation. La déformation de transformation sera donc la somme d'une déformation isotrope (changement de densité entre les deux phases) et une déformation dirigée dans la direction de la sollicitation extérieure. Nous retiendrons de cette approche le formalisme identique quelle que soit la nature de la transformation qui induit la plasticité de transformation. La proportionnalité avec le déviateur des contraintes permet de retrouver le caractère directionnel de cette déformation qui s'effectue dans la même direction que la déformation plastique classique.

6.1.2 Sources de déformations liées aux transformations de phase

On admettra tout d'abord qu'il y a additivité des déformations structurales (plasticité de transformation et changement de volume) avec les autres déformations classiques élastiques et inélastiques [Giusti81]:

$$\dot{\epsilon}^t = \underbrace{\dot{\epsilon}^{el} + \dot{\epsilon}^{th} + \dot{\epsilon}^{vp}}_{classique} + \underbrace{\dot{\epsilon}^{tr} + \dot{\epsilon}^{pt}}_{couplage} \quad (6.3)$$

- el = élastique; th = thermique; tr = changement de volume
- vp = viscoplastique; pt = plasticité de transformation

Les termes $\dot{\epsilon}^{tr}$ et $\dot{\epsilon}^{pt}$ que nous avons rajoutés assurent le couplage avec l'évolution micro-structurale.

6.1.3 Déformation par changement de phase

Ce terme est sphérique et prend en compte le changement de densité, et a pour expression [Denis et al.87]:

$$\dot{\epsilon}_k^{tr} = \epsilon_{o,k}^{tr} \dot{y}_k \mathbf{1} \quad (6.4)$$

$\epsilon_{o,k}^{tr}$ est une constante par matériau pour chaque phase k , et représente le changement de volume par rapport à une température de référence.

6.1.3.1 Modèle d'écoulement pour la plasticité de transformation

– **seuil d'écoulement:**

Étant donné que le mécanisme plastique induit par les transformations est de même type que le mécanisme *classique*, déplacement des dislocations, [Videau et al.94] introduisent une fonction de charge Φ associée aux mécanismes de plasticité de transformation:

$$\Phi = (s - \alpha) : (s - \alpha) - R(\bar{\epsilon}^{pt}), \quad (6.5)$$

s est le déviateur des contraintes, α la contrainte cinématique, et R le seuil. Expérimentalement, on constate que la plasticité de transformation apparaît pour des contraintes très faibles. On peut supposer que $R(\bar{\epsilon}^{pt}) \simeq 0$. α traduit la quantité de contraintes internes générées par la déformation structurale inélastique. Il est difficile d'apprécier la quantité de dislocations mises en jeu par ce phénomène. Certains auteurs [Giusti81][Sjtrm85] la considèrent nulle ou négligeable. Dans ce cas la fonction Φ est *dégénérée* et il n'y a plus de seuil ni d'écrouissage. [Videau et al.96] ont montré expérimentalement qu'une déformation préalable de la phase mère, réduit fortement la plasticité de transformation si le nouveau chargement s'effectue dans la direction opposée à la précédente. Par contre la déformation n'entraîne pas de variation conséquente sur la plasticité de transformation si le chargement est dans la même direction que précédemment. Cela signifie qu'il existe un phénomène physique d'écrouissage au même titre que la plasticité classique, et qui selon les considérations expérimentales est de type cinématique.

– **Loi d'écoulement:**

On peut définir également une loi d'écoulement de plasticité de transformation, et compte tenu des mécanismes plastiques en jeu, nous admettrons les hypothèses de normalité pour Φ [Videau et al.94]:

$$\dot{\epsilon}^{pt} = \kappa' \frac{\partial}{\partial s} \Phi(s) \quad ; \quad \kappa' \geq 0 \quad (6.6)$$

Si l'on néglige la partie cinématique sur la plasticité de transformation, on obtient une expression de la plasticité de transformation:

$$\dot{\epsilon}^{pt} = \kappa s. \quad (6.7)$$

On retrouve par ce formalisme mécanique le résultat expérimental (cf 6.2) avec $\kappa = kf(y)\dot{y}$.

Dans notre modèle nous ne conserverons pas l'écrouissage cinématique de la plasticité de transformation, que nous considérerons comme négligeable.

6.1.4 Modèle d'homogénéisation

L'objectif de l'homogénéisation est d'obtenir le comportement macroscopique d'un volume élémentaire (dans notre cas le volume associé à un point d'intégration) constitué d'un agrégat de volume ayant des comportements mécaniques différents (exemple *figure*

6.2). Une première génération de modèles d'homogénéisation a vu le jour au début du siècle, résultant d'approximations assez grossières, comme les modèles de Sachs et Taylor qui représentent les bornes maximales et minimales, ou plus récemment les modèles auto-cohérents basés sur la solution d'Eshelby du problème d'inclusion.

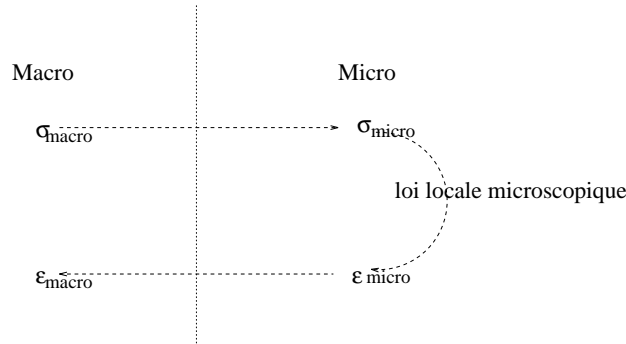


FIG. 6.2 – *Passage macro \leftrightarrow micro \leftrightarrow macro par l'intermédiaire d'une loi locale microscopique.*

On souligne la difficulté de notre problème qui intègre dans la loi de comportement le couplage avec le changement structural. Appliquer un modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique sur un problème évolutif (fraction de chaque phase non constante dans le temps) en prenant en compte le phénomène de plasticité de transformation pour tout type de transformation structurale est illusoire à l'heure actuelle. Peut être un jour des nouvelles techniques comme les matériaux digitaux, associés à la puissance de calcul, permettront une approche plus locale. C'est pourquoi la plupart des auteurs dans le domaine du traitement thermique [Sjtrm85][Denis et al.87][Inoue et al.92][Nagasaka et al.93]...emploient un modèle simpliste mais réaliste basé sur une loi de mélange linéaire. Nous avons adopté la loi de mélange sur les caractéristiques mécaniques de chaque constituant:

$$\sigma_{00} = \sum_{k=1}^{nbphase} y_k \sigma_{00,k}, \quad (6.8)$$

La contrainte équivalente et la contrainte cinématique se mettent alors sous la forme:

$$\sigma_{eq} = \sigma_{00} + \sum_{k=1}^{nbphase} (1 - \beta_k) [y_k H_k \bar{\epsilon}_k^{n_k}] + \sum_{k=1}^{nbphase} [y_k K_k] \dot{\bar{\epsilon}} \left[\sum_{k=1}^{nbphase} y_k m_k \right], \quad (6.9)$$

$$x = \sum_{k=1}^{nbphase} y_k x_k, \quad (6.10)$$

on écrira alors pour x_k la variation en fonction du temps suivante \dot{x}_k :

$$\dot{x}_k = \frac{2}{3} \beta_k n_k H_k^{(n_k-1)} \epsilon^{vp} + \frac{1}{n_k H_k^{(n_k-1)}} \frac{\partial (n_k H_k^{(n_k-1)})}{\partial t} x_k, \quad (6.11)$$

avec la contrainte,

$$\sum_{k=1}^{nbphase} y_k = 1 \quad et \quad \sum_{k=1}^{nbphase} \dot{y}_k = 0. \quad (6.12)$$

Les équations 6.8 et 6.9 donnent la loi de mélange utilisée pour définir la contrainte équivalente. Dans le cas où il y a écrouissage cinématique (introduit par le facteur β) on écrira pour la variation de la contrainte interne x (équation 6.11) la même homogénéisation que sur la contrainte équivalente σ_0 .

Les coefficients élastiques, le module d'Young et le coefficient de Poisson, sont obtenus par une loi de mélange:

$$E = \left[\sum_{k=1}^{nbphase} y_k E_k \right], \quad \nu = \left[\sum_{k=1}^{nbphase} y_k \nu_k \right]. \quad (6.13)$$

Pour la dilatation, on adopte une loi des mélanges sur le coefficient de dilatation:

$$\dot{\epsilon}^{th} = \left[\sum_{k=1}^{nbphase} y_k \alpha_k \right] \dot{T} \quad (6.14)$$

Enfin, les déformations par changement de phase $\dot{\epsilon}^{tr}$ et par plasticité de transformation $\dot{\epsilon}^{pt}$ s'écrivent [Denis et al.87]:

$$\dot{\epsilon}^{pt} = \left[\sum k_k f_k(y_k) \dot{y}_k \right] s = \kappa s \quad et \quad \dot{\epsilon}^{tr} = \sum \epsilon_{o,k}^{tr} \dot{y}_k 1 \quad (6.15)$$

6.1.5 Écrouissage de chaque phase

Les proportions des phases sont évolutives, et se pose alors le problème de la restauration de la déformation au cours du changement de phase. En effet, si l'austénite mère subit une déformation $\bar{\epsilon}^{vp}$, on peut se demander de quelle manière cette déformation est transmise à la nouvelle phase fille. Autrement dit, que devient la densité de dislocation pendant une transformation de phase? Différents modèles ont été proposés pour tenir compte d'une restauration de l'écrouissage pendant la transformation de phase [Sjtrm85][Videau et al.94]. Pour notre part nous utiliserons le modèle de [Sjtrm85]:

On écrira pour la déformation d'une phase k ayant subi une déformation $\Delta \bar{\epsilon}^{vp}$ durant un temps Δt pendant lequel elle s'est accrue de Δy :

$$\bar{\epsilon}^{vp}(t + \Delta t)_k = (1 - \gamma_k) \frac{y_k [\bar{\epsilon}_k^{vp}(t) + \Delta \bar{\epsilon}^{vp}] + \Delta y_k \Delta \bar{\epsilon}^{vp}}{y_k + \Delta y_k} + \gamma_k \bar{\epsilon}^{vp}(t + \Delta t) \quad (6.16)$$

La même remarque est valable pour l'écoulement cinématique; dans ce cas [Sjtrm85] écrit:

$$x(t + \Delta t)_k = (1 - \gamma_k) \frac{y_k[x_k(t) + \Delta x] + \Delta y_k \Delta x}{y_k + \Delta y_k} + \gamma_k x(t + \Delta t) \quad (6.17)$$

Le facteur γ_k permet justement de prendre en compte un effet de restauration total ou partiel. $\gamma_k = 0$ restauration totale, $\gamma_k = 1$ on parlera alors de mémoire totale. Ces valeurs étant difficile à déterminer expérimentalement, on considérera le plus souvent un effet de restauration totale.

remarque:

On définira de la même manière la quantité de déformation *plasticité de transformation équivalente* par:

$$\bar{\epsilon}^{pt} = \sqrt{\frac{3}{2} \dot{\epsilon}^{pt} : \dot{\epsilon}^{pt}} \quad \text{et} \quad \bar{\epsilon}^{pt} = \int \dot{\epsilon}^{pt} dt \quad (6.18)$$

Cette variable $\bar{\epsilon}^{pt}$ sera une estimation de la déformée due aux mécanismes structuraux par rapport à $\bar{\epsilon}^{vp}$ représentant la déformation viscoplastique.

6.1.6 Modification de la loi de comportement

6.1.6.1 Loi de comportement intégrant le couplage mécanique-métallurgie

L'intégration du couplage mécanique-métallurgie modifie le système d'équations 2.27, 2.28, et 2.29 qui définit la loi de comportement incrémentale. On obtient alors le problème suivant:

– charge ou décharge élastique avec transformation

$$(1) \left\{ \begin{array}{lcl} \dot{e}^t & = & \dot{e}^{el} + \dot{e}^{pt} \\ \dot{e}^{el} & = & \frac{\dot{s}}{2\mu} - \frac{1}{2\mu^2} \frac{\partial \mu}{\partial t} s \\ \dot{e}^{pt} & = & \kappa s \\ \dot{e}^{vp} & = & 0 \\ \hookrightarrow \dot{s} & = & 2\mu(\dot{e}^t - \kappa s) + \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial t} s \\ \hookrightarrow \dot{x} & = & 0 \end{array} \right. \quad (6.19)$$

– charge élastoplastique avec transformation:

$$(2) \left\{ \begin{array}{lcl} \dot{\epsilon}^t & = & \dot{\epsilon}^{el} + \dot{\epsilon}^{vp} + \dot{\epsilon}^{pt} \\ \dot{\epsilon}^{el} & = & \frac{\dot{s}}{2\mu} - \frac{1}{2\mu^2} \frac{\partial \mu}{\partial t} s \\ \dot{\epsilon}^{pt} & = & \kappa s \\ \dot{\epsilon}^{vp} & = & \dot{\lambda}(s - x) \\ \hookrightarrow \dot{s} & = & 2\mu[\dot{\epsilon}^t - \dot{\lambda}(s - x) - \kappa s] + \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial t} s \\ \hookrightarrow \dot{x} & = & \sum_{k=1}^{nbphase} y_k \dot{x}_k \end{array} \right. , \quad (6.20)$$

Avec l'équation d'incompressibilité viscoplastique qui comprend maintenant la déformation par transformation de phases:

$$(3) \dot{p} = -\chi(tr\dot{\epsilon}^t - tr\dot{\epsilon}^{th} - tr\dot{\epsilon}^{tr}) + \frac{1}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial t} p \quad (6.21)$$

La résolution incrémentale est identique à celle présentée au § 2.2.3, la plasticité de transformation et la déformation par changement de phase n'entraînant aucune difficulté numérique.

Les transitions entre la déformation élasto-viscoplastique et élastique sont gérées de la même manière que dans le cas sans effet métallurgique. On notera cependant une limitation de la loi de mélange avec ce type de résolution élasto-viscoplastique:

la loi de mélange peut entraîner un comportement plastique au niveau du mélange alors que celui de la phase prise séparément peut se situer dans le domaine élastique (ou inversement). C'est notamment le cas de la martensite qui présente un seuil σ_{00} élevé. L'hypothèse de la loi de mélange n'est pas trop forte tant que l'on reste dans le cadre des petites déformations (déformation de l'ordre de 1%), ce qui ne serait pas le cas en forgeage par exemple.

6.2 Couplage thermique-métallurgie

6.2.1 Méthode en capacité et conductivité équivalente

Les paramètres thermophysiques de l'équation de la chaleur ainsi que la chaleur latente sont englobés dans une même variable ΔH qui est l'enthalpie du mélange global. La méthode enthalpique définit [Pham86][Menai95] des valeurs équivalentes de ρc et k :

$$\Delta H_{T_0}^T(T) = \int_{T_0}^T \rho c dT \quad \text{et également} \quad G_{T_0}^T(T) = \int_{T_0}^T \frac{1}{k} dT. \quad (6.22)$$

Ces expressions permettent de déterminer en chaque point une valeur approchée de ρc_{eq} et k_{eq} telles que:

$$(\rho c)_{eq} = \frac{\|grad(\Delta H)\|}{\|grad(T)\|} \quad \text{et} \quad k_{eq} = \frac{\|grad(T)\|}{\|grad(G)\|}, \quad (6.23)$$

en utilisant la notion de grandeurs équivalentes, l'équation 3.1 devient:

$$\rho c_{eq} \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}[k_{eq} \text{grad}(T)] + \dot{W} \quad \text{avec} \quad \dot{W} = r \dot{W}_d, \quad (6.24)$$

\dot{W} est le taux de chaleur interne approché par la puissance de déformation \dot{W}_d multipliée par $r < 1$ pour tenir compte des autres effets de dissipation interne.

$$\dot{W}_d = \sigma : \dot{\epsilon}^{vp}. \quad (6.25)$$

Cette méthode respecte la conservation globale de l'énergie, et l'enthalpie de transformation sera valable pour une transformation qui correspond à l'état d'équilibre (aucune cinétique de transformation de phases). Elle assure une bonne stabilité du système lors du changement de phase où il y a une discontinuité des valeurs thermophysiques. Par contre, il faudra choisir un pas de temps tel que ΔT soit faible devant le $\Delta T_{\text{changement de phase}}$. De plus, cette approche est valable dans le cas où la transformation est relativement lente, c'est pourquoi elle est utilisée pour la simulation de la fonderie par exemple [Jaouen98]. Dans le cas des traitements thermiques, les transformations peuvent être très rapides et cette approche n'est plus valable car elle suppose que le dégagement de chaleur est indépendant de la vitesse de refroidissement (ou indépendant de la cinétique de transformation, ce qui revient au même). On a recours à une approche plus physique qui fait intervenir une source de chaleur interne au cours de la transformation en traitant les changements de phase par phase et non plus au niveau du mélange global.

6.2.2 Méthode du terme source

La prise en compte du changement de propriétés thermophysiques se fait localement par une loi de mélange sur les phases [Fernandes et al.86]:

$$(\rho c) = \sum_{k=1}^{nbphase} y_k (\rho c)_k \quad \text{et} \quad k = \sum_{k=1}^{nbphase} y_k k_k, \quad (6.26)$$

La chaleur latente est alors considérée comme un terme de source interne \dot{W}_{tr} au même titre que la puissance de déformation mécanique \dot{W}_d . Le terme de couplage s'écrit $\dot{W} = \dot{W}_{tr} + \dot{W}_d$. [Prakash et al.81] proposent pour le terme de chaleur latente la relation suivante:

$$\dot{W}_{tr} = \sum_{k=1}^{nbphase} \dot{y}_k \Delta H(T)_k \quad \text{avec} \quad \Delta H(T)_k \text{ chaleur latente de transformation,} \\ \text{approchée par un polynôme en } T. \quad (6.27)$$

L'équation de la chaleur s'écrit dans le cas multiphasé comme:

$$\left[\sum_{k=1}^{nbphase} y_k (\rho c)_k \right]_{r\sigma : \dot{\epsilon}^{vp}} \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} \left\{ \left[\sum_{k=1}^{nbphase} y_k k_k \right] \text{grad} \vec{T} \right\} + \left[\sum_{k=1}^{nbphase} \dot{y}_k \Delta H(T)_k \right] + \quad (6.28)$$

Ce formalisme permet de prendre en compte la variation des propriétés thermophysiques et le couplage thermique-métallurgie avec le terme \dot{W}_{tr} .

6.3 Couplage thermo-métallo-mécanique

Le couplage entre les équations se fait par échange des variables d'état comme montré sur la figure au § 1 *figure 1.5*. Notre choix est un couplage fort assuré par un point fixe pour le calcul thermo-métallurgique (*figure 6.3*), et un couplage alterné par incrément pour le calcul thermo-métallurgique et mécanique; thermo-métallo-mécanique (*figure 6.4*).

6.3.1 Algorithme de couplage thermo-métallurgique

La méthode utilisée consiste à effectuer à chaque incrément de temps une résolution de l'équation de la chaleur 6.28 puis un calcul des fractions transformées et à itérer jusqu'à atteindre le point fixe solution.

Le schéma du point fixe est de type Gauss-Seidel qui présente une meilleure convergence que le schéma de Jacobi:

1. Pour les itérations de Jacobi:

On résout le problème 6.28 $P_1(T_{(k)}, Y_k)$ qui détermine la température T_{k+1} , puis on calcule la croissance des phases avec $P_2(T_k, Y_{(k)})$ qui détermine Y_{k+1} (*figure 6.3a*)).

2. Pour les itérations de Gauss-Seidel:

On résout le problème 6.28 $P_1(T_{(k)}, Y_k)$ qui détermine la température T_{k+1} , puis on calcule la croissance des phases avec $P_2(T_{(k+1)}, Y_{(k)})$ qui détermine Y_{k+1} (*figure 6.3b*)).

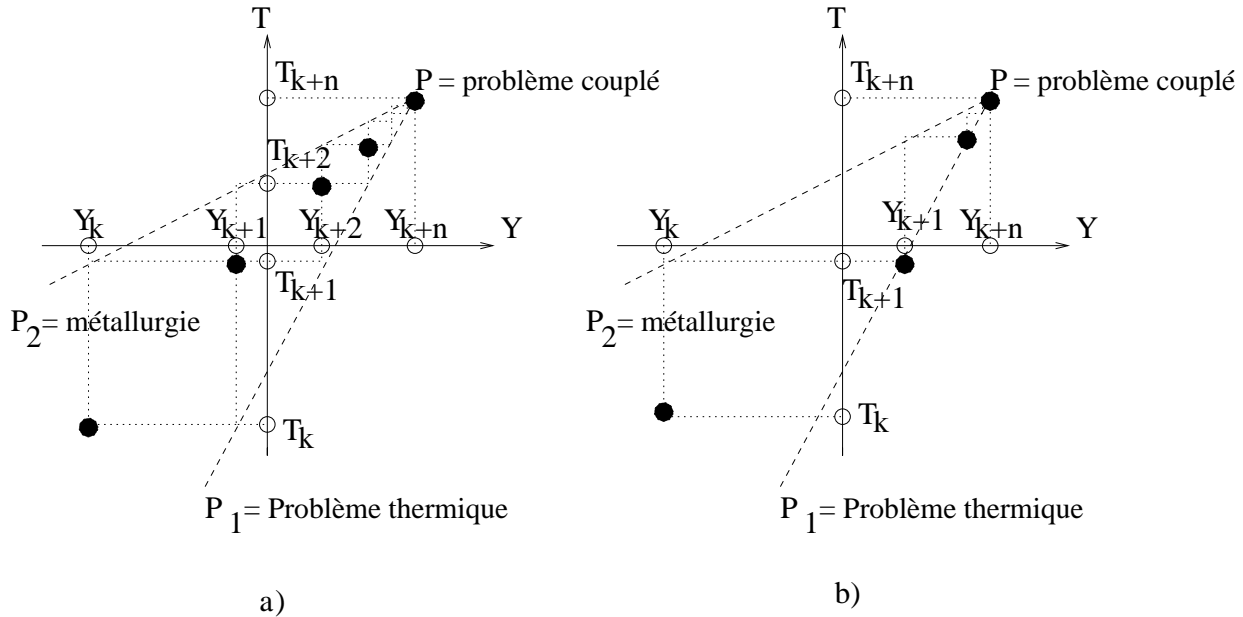


FIG. 6.3 – méthode de couplage thermo-métallurgique: a) Jacobi; b) Gauss-Seidel adopté

Lorsque $P_1 = P_2$, on obtient la solution du problème couplé $P(T, Y)$. Pour chaque calcul thermique (résolution de P_1), on détermine le bon choix du pas de temps à adopter

(cf § 3.4). Typiquement cela conduit à un calcul de 3 à 5 résolutions thermiques dans les cas fortement couplés (dégagement enthalpique important, ou croissance rapide d'une phase).

6.3.2 Algorithme de couplage thermo-métallo-mécanique

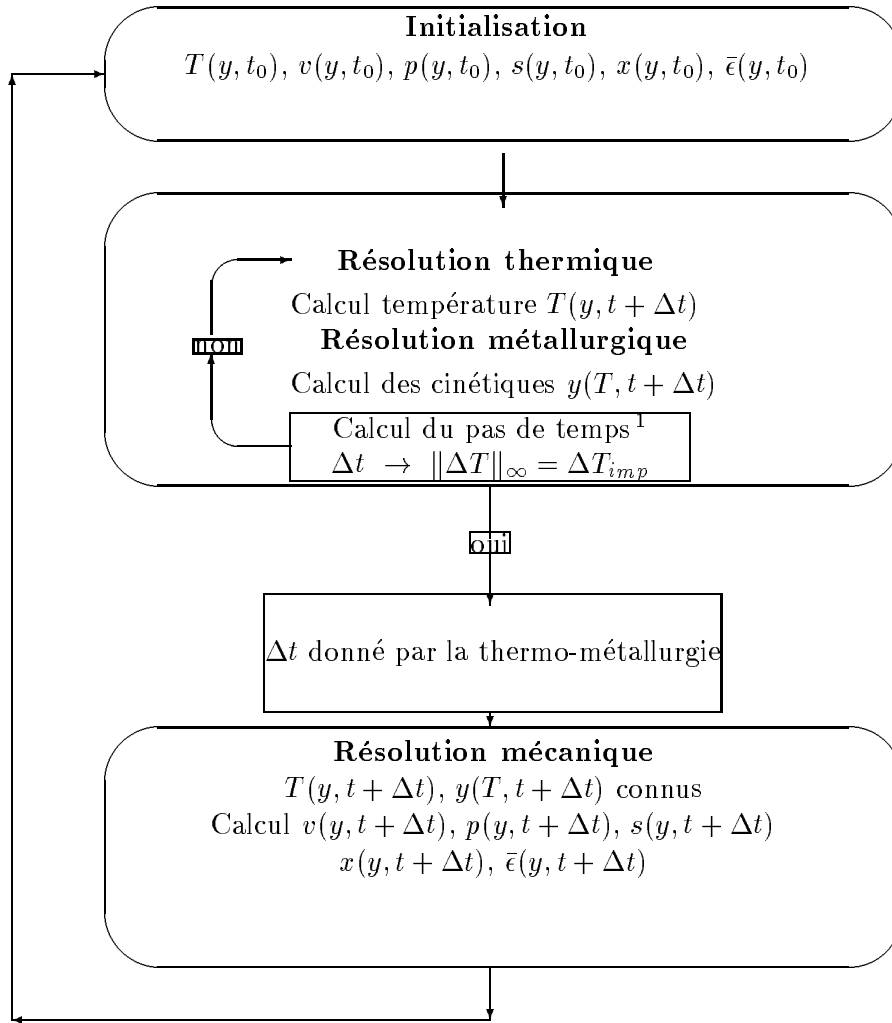


FIG. 6.4 – Algorithme de résolution couplée thermo-métallo-mécanique.

6.4 Conclusion

Le modèle que nous présentons intègre les couplages métallurgie-thermique et métallurgie-mécanique. Il est organisé suivant une série de résolutions séquentielles où se succèdent sur chaque incrément de calcul la résolution thermo-métallurgique, et mécanique. Le pas de temps est géré par le calcul thermo-métallurgique pour suivre l'évolution des transformations de phases qui généreront des contraintes internes importantes.

Le prochain chapitre est dédié aux applications numériques. Applications académiques simples dans un premier temps pour vérifier la cohérence des réponses du modèle. Puis nous montrerons quelques exemples industriels pour illustrer la faisabilité du modèle dans des conditions tridimensionnelles réelles.

1. $\|\Delta T\|_\infty$ = variation maximale de la température sur la pièce, ΔT_{imp} = consigne demandée (cf § 3.4).

Bibliographie

- [Denis et al.87] Denis (S.), Sjötröm (S.) et Simon (A.). – Coupled temperature, stress, phase transformation calculation model. numerical illustration of the internal stress evolution during cooling of an eutectoid carbon steel. *Metal. Trans. A*, vol. 18A, Juillet 1987, pp. 1203–1212.
- [Diani et al.92] Diani (J.M.), Sabar (H.) et Berveiller (M.). – Micromechanical modelling of the transformation induced plasticity (trip) phenomenon in steels. *Int. J. Eng. Sci.*, vol. 33, n° 13, 1992, pp. 1921–1934.
- [Fernandes et al.86] Fernandes (F.), Denis (S.) et Simon (A.). – Prévision de l'évolution thermique et structurale des aciers au cours de leur refroidissement continu. *Mémoires et Etudes Scientifiques Revue de Métallurgie*, Juillet–Aout 1986, pp. 355–365.
- [Gautier et al.87] Gautier (E.), Simon (A.) et Beck (G.). – Plasticité de transformation durant la transformation perlitique d'un acier eutectoïde. *Acta metallurgica*, vol. 35, n° 6, 1987, pp. 1367–1375.
- [Gautier et al.89] Gautier (E.) et Simon (A.). – Transformation plasticity and resulting microstructures for strain induced martensitic transformation in fe-ni-c alloy. *Proc."The Martensitic Transformation in Science and Technology" Bochum.*, vol. EURO-CM-PAR99, n° Ed. E. Hornbogen, N. Jost, DGM, mars 1989, p. 451.
- [Gautier et al.95] Gautier (E.), Zhang (J.S.) et Zhang (X.M.). – Martensitic transformation under stress in ferrous alloys. mechanical behaviour and resulting morphologies. *Journal de Physique IV, colloque c8, supplément au journal de physique III*, vol. 5, Décembre 1995.
- [Giusti81] Giusti (J.). – *Contraintes et deformations résiduelles d'origine thermique application au soudage et à la trempe des aciers.* – Thèse de doctorat, Université de Paris VI, 1981.
- [Greenwood et al.65] Greenwood (G.W.) et Johnson (R.H.). – The deformation of metal under small stresses during phase transformation. *Proc .R. Soc.*, vol. A283, 1965, p. 403.
- [Inoue et al.92] Inoue (T.), Ju (D.Y) et Arimoto (K). – Metallo-thermo-mechanical simulation of quenching process. theory and implementation of computer code 'hearts'. *Proceeding of the first international conference on quenching and control of distortion, Chicago, Illinois, USA*, septembre 1992.
- [Jaouen98] Jaouen (O.). – *Modélisation tridimensionnelle par éléments finis pour l'analyse thermo-mécanique du refroidissement des pièces coulées.* – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1998.
- [Menai95] Menai (M.). – *Simulation numérique tridimensionnelle du refroidissement des pièces en fonderie, approche thermomécanique.* – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1995.
- [Nagasaka et al.93] Nagasaka (Y.) et Brimacombe (J.K.). – Mathematical model of phase transformation and elastoplastic stress in the water spray quenching of steel bars. *Metallurgical transaction*, vol. 24A, 1993, pp. 795–808.

- [Pham86] Pham (Q.T.). – The use of lumped capacitance in the finite-element solution of heat conduction problem with phase change. *Int. J. Mass Transfer.*, vol. 29, n° 2, 291 1986, p. 285.
- [Prakash et al.81] Prakash, Agarwau (K.) et Brimacombe (J.K.). – Mathematical model of heat flow and austenite-pearlite transformation in eutectoid carbon steel rods for wire. *Metallurgical transaction*, vol. 12B, 1981, pp. 121–133.
- [Sjtrm85] Sjötröm (S.). – Interactions and constitutive models for calculating quench stresses in steel. *Materials science and technology*, vol. 1, octobre 1985, pp. 823–829.
- [Videau et al.94] Videau (J.C.), Cailletaud (G.) et Pineau (A.). – Modélisation des effets mécaniques des transformations de phase pour le calcul de structure. *Journal de physique colloque c3, supplément au journal de physique III*, vol. 4, février 1994.
- [Videau et al.96] Videau (J.C.), Cailletaud (G.) et Pineau (A.). – Experimental study of the transformation induce plasticity in a cr-ni-mo-al-ti steel. *Journal de Physiques*, vol. 6, janvier 1996, pp. 465–474.

Chapitre 7

Exemples de simulations numériques

Sommaire

7.1 Trempe martensitique: 60NCD11	146
7.1.1 Couplage thermique-métallurgie	146
7.1.2 Couplage thermique-métallurgie-mécanique	146
7.1.3 Influence de la nature de l'écrouissage	151
7.1.4 Couplage contrainte-transformation de phases	151
7.1.5 Paramètres numériques	152
7.2 Traitement perlitique: XC80	154
7.2.1 Couplage thermique-métallurgie	154
7.2.2 Couplage thermique-métallurgie-mécanique	155
7.2.3 Couplage contrainte-transformation de phases	156
7.2.4 Conclusion sur les premiers calculs	156
7.3 Calculs sur cylindre massif: comparaison matériau homogène et hétérogène	160
7.4 Exemples industriels de simulations numériques	167
7.4.1 Calcul sur coupon de rail	167
7.4.2 Calcul sur un pignon automobile	171
7.4.3 Calcul sur une pièce massive de grande dimension	177
7.5 Conclusion	180
Bibliographie	180

Une validation complète du modèle avec prise en compte de tous les niveaux de couplages est difficile à mettre en place. Nous avons testé notre travail en validant les modules de couplages les uns après les autres. Une première étape consiste à tester le modèle 3D sur des exemples simples qui permettront de juger la pertinence des résultats obtenus.

Nous commençons par simuler des formes simples, cylindres longs, ce qui ramène l'étude à une analyse mono-dimensionnelle du problème. Dans un premier temps on étudiera la trempe martensitique d'un acier 60NCD11, puis le refroidissement relativement lent d'un acier XC80. Ces cas ont fait l'objet d'analyses détaillées au LSG2M [Denis et al.87] et des confrontations de résultats obtenus avec FORGE2 et Quest ont été réalisés [Colonna92]. Nous ne présentons ici que les comparaisons de résultats obtenus avec FORGE2 et FORGE3. Ces deux types de refroidissement borneront le problème avec, d'une part un refroidissement rapide avec un fort gradient thermique et une transformation caractéristique martensitique, et d'autre part un refroidissement lent sans gradient thermique mais avec une transformation perlitique à forte recalescence.

Dans une deuxième étape nous simulerons toujours un cylindre long, mais avec un refroidissement entraînant tous les types de transformations; ferritique, perlitique, bainitique et martensitique. Nous montrerons en particulier la prise en compte de la teneur en carbone dans la résolution de la thermique, de la métallurgie et de la mécanique.

Nous terminerons cette partie sur des exemples d'applications industrielles, ce qui permettra de tester la capacité du modèle dans des conditions de traitements thermiques réels.

7.1 Trempe martensitique: 60NCD11

On simule une trempe à l'eau d'un cylindre long en acier 60NCD11 de rayon 35 mm. Les données du test ont été fournies par le LSG2M: la rhéologie est élastoplastique, les termes visqueux sont négligés pour ces vitesses de refroidissement. La thermique est non linéaire et le coefficient de transfert h est fonction de la température de surface, la température de début de martensite M_s est de $247^{\circ}C$.

7.1.1 Couplage thermique-métallurgie

Cette trempe est caractérisée par une vitesse de refroidissement élevée, qui se traduit par un gradient de transformation martensitique du centre au bord du cylindre. Les résultats des *figures* 7.1, 7.2 montrent une bonne correspondance entre les modèles 2D et 3D. Notamment on retrouve pour les deux modèles le dégagement thermique interne par transformation de phase au centre du cylindre, ainsi qu'un changement brusque du comportement thermique en raison de la modification des propriétés au passage austénite-martensite.

7.1.2 Couplage thermique-métallurgique-mécanique

L'évolution de la contrainte axiale σ_{zz} représentée sur la figure 7.3, permet d'étudier les effets au cours du refroidissement de la transformation martensitique sur l'évolution de

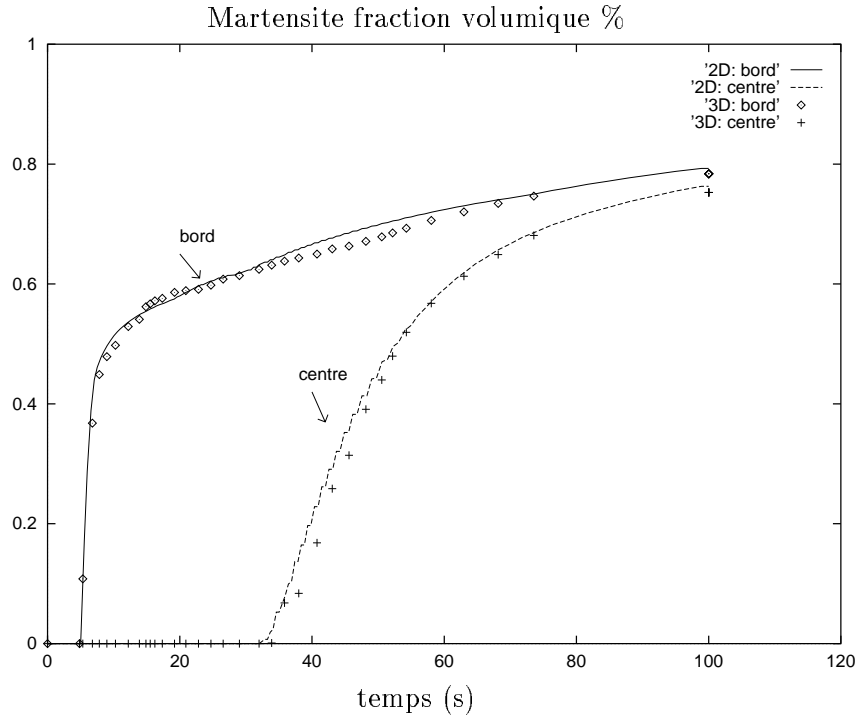


FIG. 7.1 – Confrontation entre les modèles 2D et 3D sur l'évolution de la martensite, au centre et au bord du cylindre

la contrainte. Jusqu'à 5s, les contraintes sont d'origine purement thermique puisqu'on se trouve au dessus de la température M_s . Lorsque celle-ci est atteinte, d'abord en surface, la déformation ϵ^{tr} due au changement de phase met en compression la surface. La mise en compression du coeur se fera plus tard vers 35s lorsqu'on atteindra au centre du cylindre la température M_s . Finalement lorsque la zone transformée s'étend sur tout le rayon, la plasticité de transformation induit une relaxation des contraintes en surface et un passage en compression du coeur. Le profil de contraintes résiduelles (*figure 7.4*) est alors fortement modifié par rapport aux contraintes d'origine purement thermique.

La différence que l'on observe entre les résultats 2D et 3D ne peut être attribuée à un gradient thermique ou métallurgique différent (bonne similitude observée entre les deux modèles *figures 7.1*, et *7.2*). Cet écart est dû aux deux points suivant:

- d'une part, le traitement de la pression est très différent; traitement par pénalisation pour le modèle 2D, et méthode mixte pour le modèle 3D. Lorsque la phase croît, la mise en compression est rapide car elle est proportionnelle à la vitesse de croissance \dot{y} de la martensite. Sur la *figure 7.1*, on note une croissance extrêmement rapide qui est la cause de l'écart observé. Cet écart n'existe pas dans le cas de la trempe sans changement de phase de l'aluminium par exemple (cf § 4.2) où l'inversion du profil de contrainte est due aux incompatibilités de déformation plastique, et non à un phénomène de compressibilité comme dans le cas des changements de phases.
- d'autre part les maillages sont ici très différents, beaucoup moins de noeuds dans le cas 3D sur une section, et il faudra faire une comparaison plus approfondie avec des maillages aussi *similaires* que possible. De ce fait on ne devrait observer qu'un écart dû au traitement de la compressibilité.

Enfin il est important de noter que le point de contrainte nulle est identique pour les deux modèles; si la contrainte au centre est sous-estimée, par équilibre mécanique de la

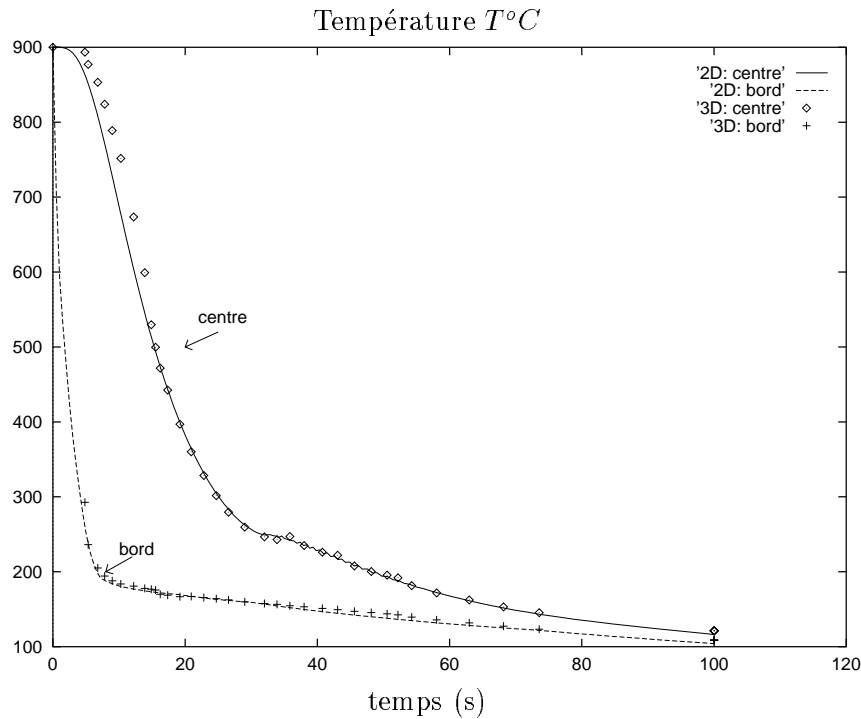


FIG. 7.2 – Confrontation entre les modèles 2D et 3D sur l'évolution de la température, au centre et au bord du cylindre

section, la contrainte en surface sera surestimée, mais le point de contrainte nulle (point neutre) reste le même.

L'écart observé est également à comparer avec l'écart du modèle sans couplage, pour qui les contraintes résiduelles se trouvent sur une échelle de -1000 MPa à $+1000$ MPa.

Cet exemple rend bien compte de l'utilité d'un tel couplage qui finalement donne des résultats opposés à un simple modèle thermo-mécanique. Ainsi l'influence du couplage peut être en partie justifiée par la plasticité de transformation équivalente. Sur la *figure* 7.5 sont représentées la plasticité de transformation équivalente et la déformation plastique équivalente. Ces deux déformations ont des ordres de grandeur équivalents, ce qui traduit une incidence équivalente sur le niveau des contraintes internes.

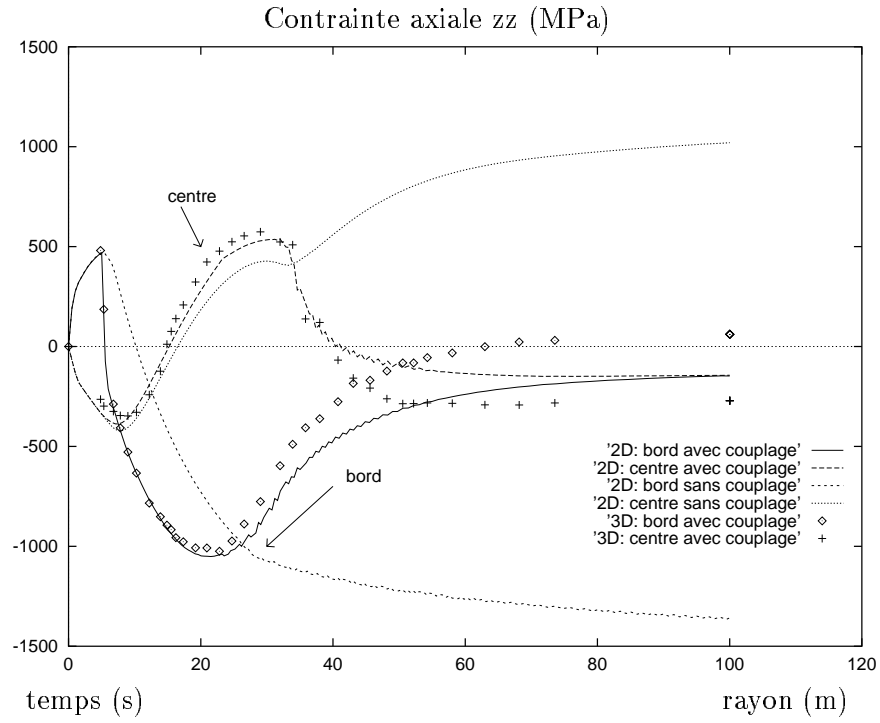
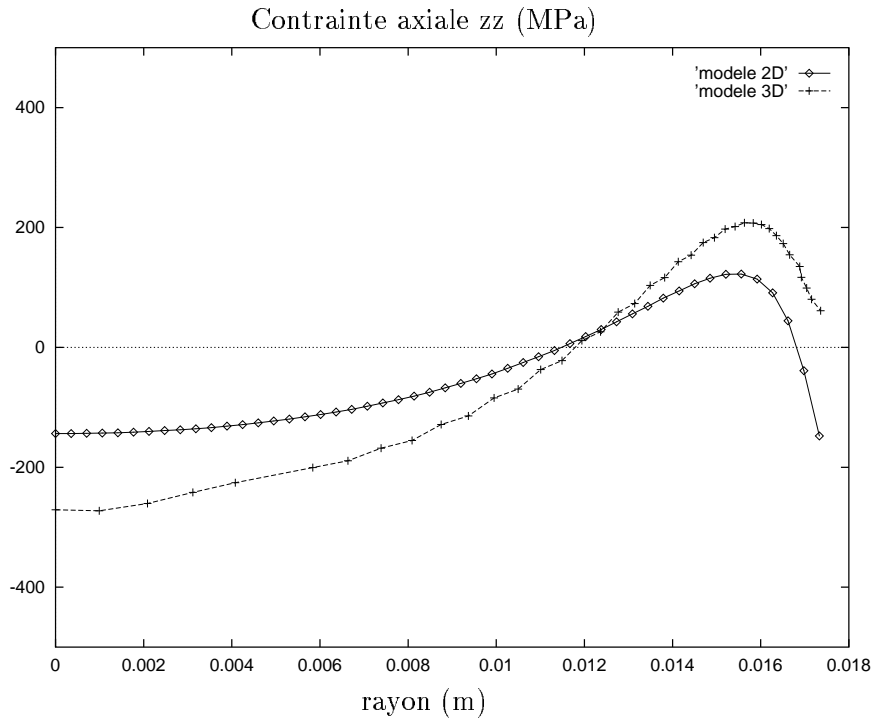
FIG. 7.3 – Trempe martensitique a) $\sigma_{zz} = f(t)$ 

FIG. 7.4 – Contraintes résiduelles

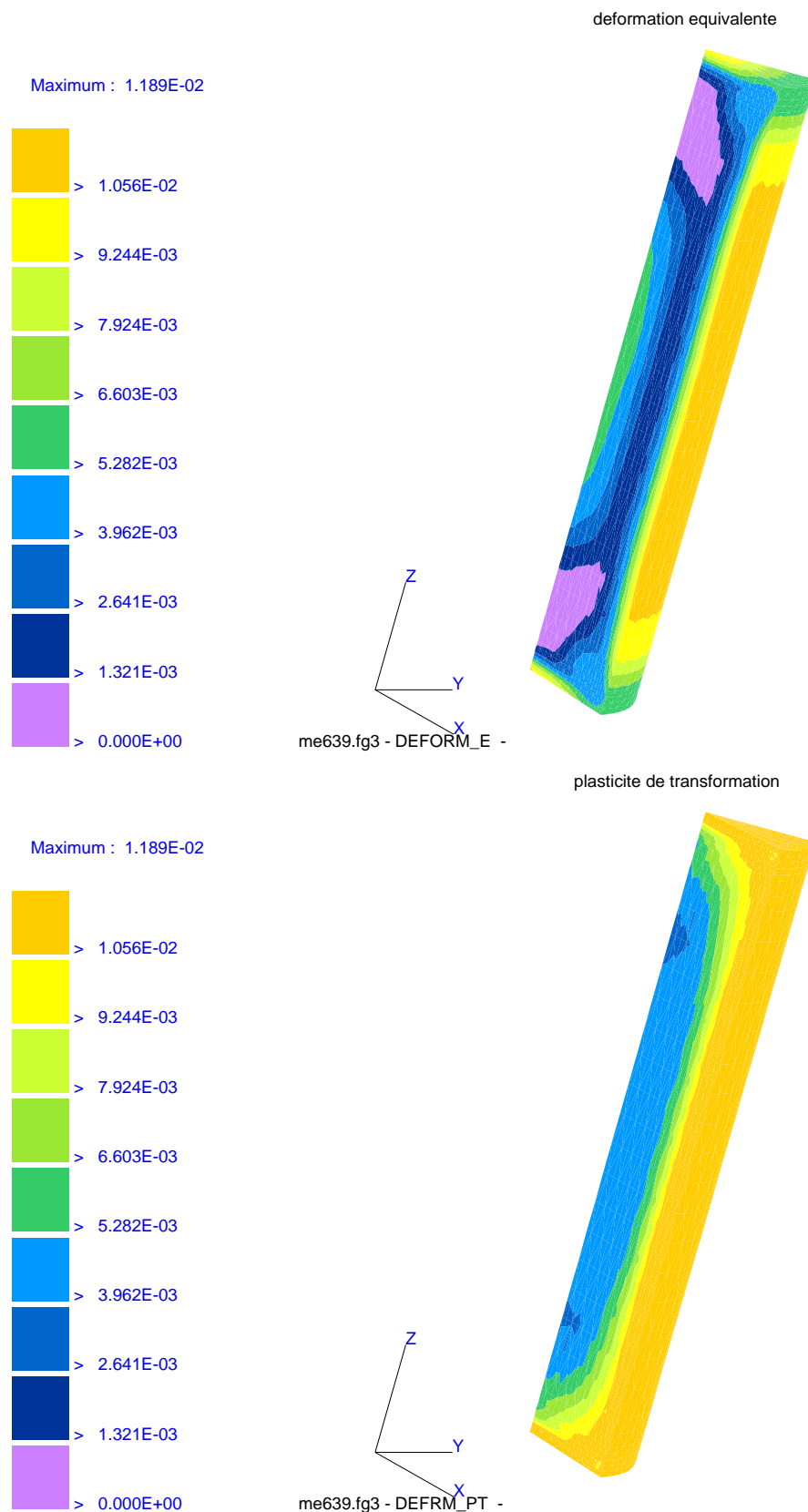


FIG. 7.5 – Comparaison déformation équivalente et plasticité de transformation 3D: trempe martensitique

7.1.3 Influence de la nature de l'écrouissage

L'écrouissage cinématique a pour rôle de modifier, par rapport à un écrouissage isotrope, la contrainte d'écoulement si le chargement change de signe (traction \leftrightarrow compression): c'est ce que l'on appelle l'effet de Bauschinger. Sur la *figure 7.6* est représentée la comparaison pour les deux modes d'écrouissage. La contrainte résiduelle (*figure 7.6*) est essentiellement modifiée en surface. La déformation plastique engendrée est faible de l'ordre de 1%, cela n'est pas suffisant pour que la nature de l'écrouissage perturbe sensiblement l'évolution des contraintes. Cette conclusion n'est pas généralisable et rien n'a été montré concernant l'influence de l'écrouissage sur les distorsions de trempe.

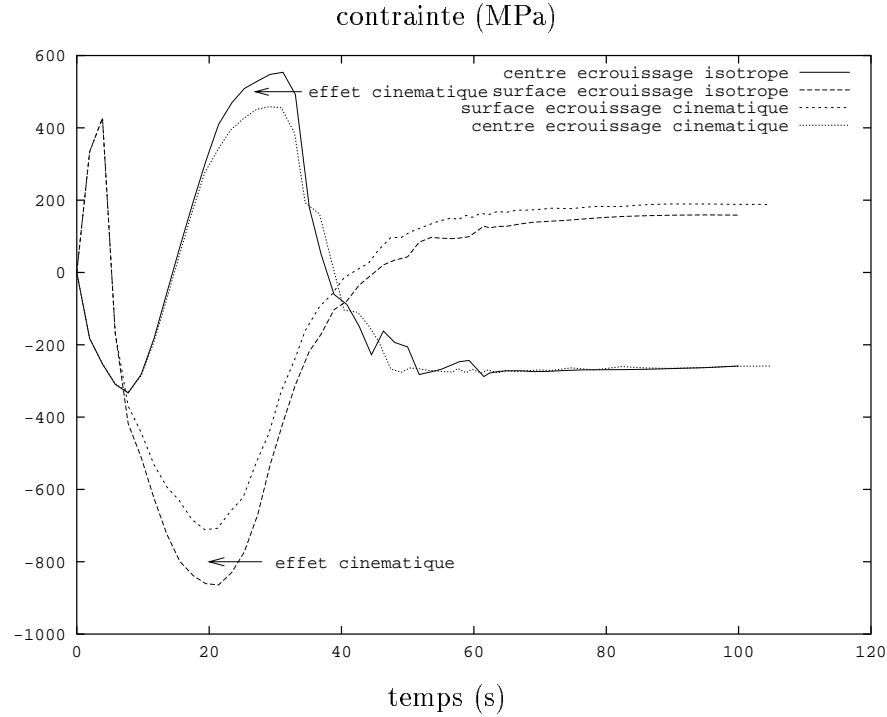


FIG. 7.6 – Comparaison des écrouissages cinématique et isotrope, calculs 3D effectués avec mémoire totale de l'écrouissage.

7.1.4 Couplage contrainte-transformation de phases

L'influence des contraintes sur la transformation martensitique a pour effet de modifier le début de la transformation par un décalage de la température M_s [Denis87].

$$M_s = M_{s0} + A.\sigma_{eq} + B.Press \quad (7.1)$$

Sur les *figures 7.7* et *7.8* est représenté l'influence des contraintes internes sur l'évolution de la martensite et en retour sur l'évolution des contraintes elles mêmes. Les débuts de transformations sont accélérés, ce qui se traduit par une évolution décalée vers les temps plus courts de la transformation martensitique. En retour, le couplage métallurgie-mécanique induit de la même manière un décalage vers les temps plus courts des phénomènes de couplages exercés sur l'évolution de la contrainte, comme par exemple la mise en compression par changement de phase au centre du cylindre.

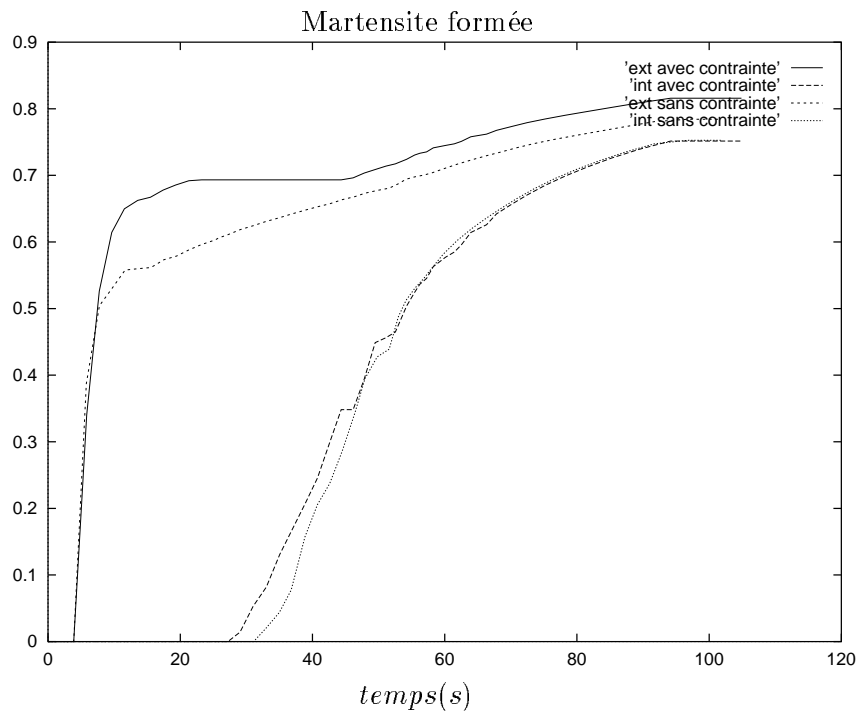


FIG. 7.7 – *Modification des cinétiques de transformation par les contraintes.*

7.1.5 Paramètres numériques

Sur la *figure 7.9* on a représenté l'évolution du pas de temps, avec l'évolution du temps CPU utilisé pour la résolution du problème global thermique-métallurgie-mécanique, au cours de la simulation. Le pas de temps évolue assez rapidement pour limiter la durée du calcul, notamment il atteint des valeurs assez importantes en fin de calcul lorsque le choc thermique est terminé. On voit sur cette figure des changements brusques du temps CPU induit par les transformations de phases. L'utilisation de l'algorithme de gestion du pas de temps (cf §3.4.1) assure au temps CPU une moyenne stable même en fin d'incrément avec de grand pas de temps.

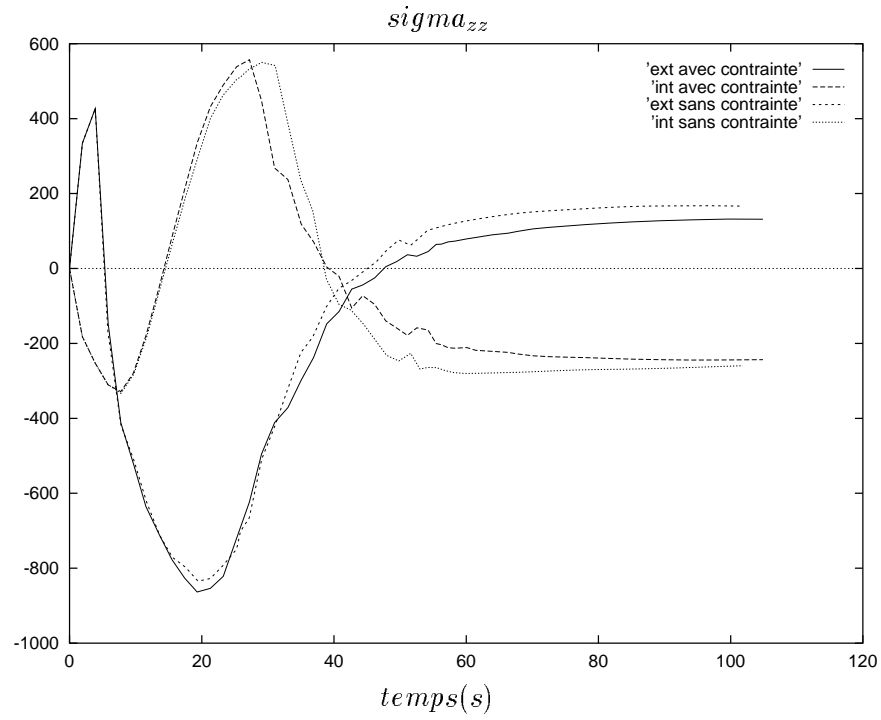


FIG. 7.8 – Modification des contraintes avec prise en compte des effets des contraintes sur les cinétiques.

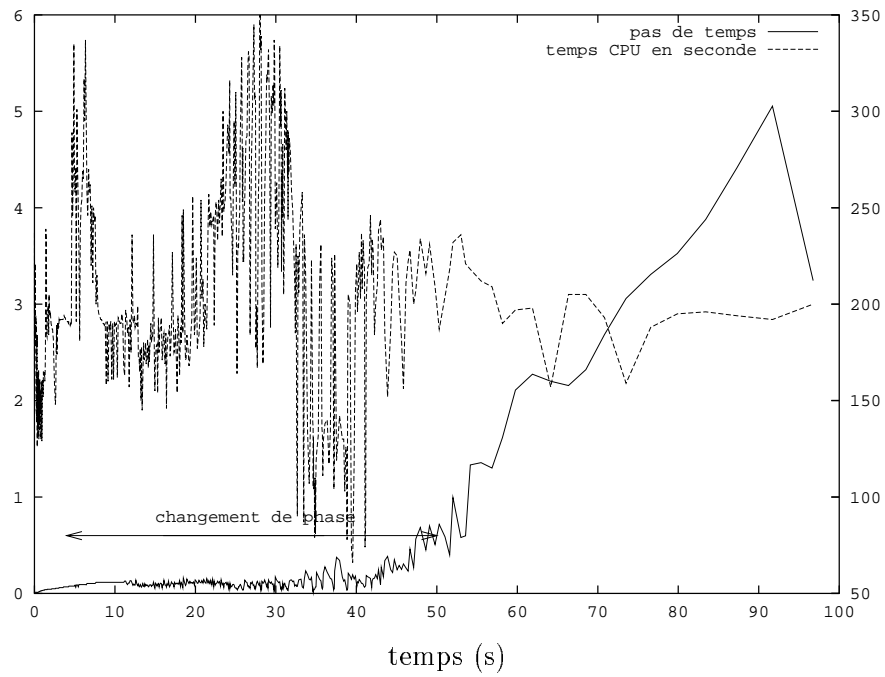


FIG. 7.9 – Évolution du pas de temps, et du temps CPU par incrément, en fonction du temps de la simulation.

7.2 Traitement perlitique: XC80

Les données relatives à ce test ont été fournies par le LSG2M. Cette simulation intègre les effets visqueux du comportement des deux phases. En effet, le refroidissement est faible compte tenu du produit de réaction voulu (perlite uniquement) et les effets visqueux ne sont plus négligeables. Le schéma de la simulation est identique au précédent calcul mais avec un cylindre de rayon de 6.5mm plus faible pour limiter les gradients thermiques entre le centre et le bord.

7.2.1 Couplage thermique-métallurgie

- La transformation perlitique se caractérise par une importante chaleur de transformation. Cette chaleur modélisée comme une source interne par le modèle, modifie le champ de température en fonction de la fraction transformée. Lorsque la phase perlitique apparaît (*figure 7.10*), la chaleur de transformation crée un accident dans le profil de refroidissement qui se traduit par une remontée locale de la température (*figure 7.11*). Ce phénomène est connu sous le nom de recalescence.

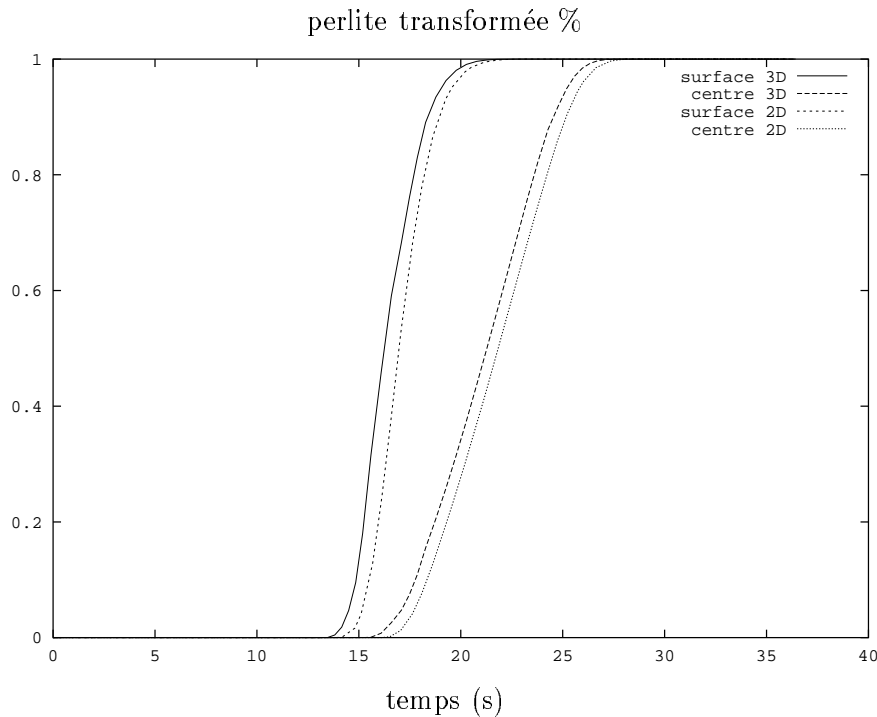


FIG. 7.10 – *Traitement perlitique: $y_{perlite\ transformée} = f(t)$, comparaisons calculs 2D et 3D.*

- Il est intéressant de modifier les conditions aux limites ou la géométrie de la pièce (ici modification du rayon) pour analyser l'influence sur la recalescence. En effet pour un rayon identique, si on diminue le coefficient de transfert, on observera une décroissance plus lente de la température ce qui doit se traduire par un effet de recalescence plus faible. De la même manière si on augmente le rayon du cylindre, la transformation à coeur sera plus lente et cela diminuera la recalescence. Sur la *figure 7.12a*) nous avons représenté l'influence de la valeur du coefficient de transfert h sur le profil de température ($h_1 = 342\text{ W/m}^2\text{ }^\circ\text{C}$, et $h_2 = \frac{h_1}{2} = 171\text{ W/m}^2\text{ }^\circ\text{C}$). La transformation est beaucoup plus lente et la recalescence s'étale

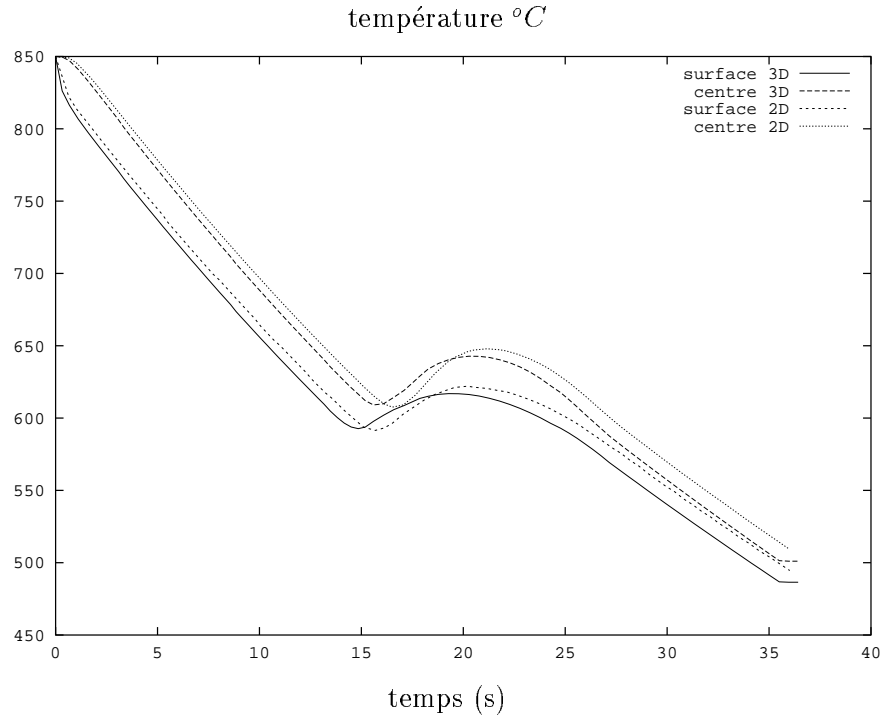


FIG. 7.11 – *Traitement perlitique* $Température=f(t)$, comparaisons calculs 2D et 3D.

sur une gamme de température plus importante.

Sur la *figure 7.12b*) nous avons représenté l'influence de la massivité de la pièce ($R_1 = 6.5\text{ mm}$ et $R_2 = 6R_1 = 39\text{ mm}$), dans ce cas la recalescence est faible en surface, mais la pièce étant plus massive, on observera à coeur une recalescence marquée.

Pour ce dernier calcul, on a représenté sur la *figure 7.13* l'évolution de la perlite en fonction du temps pour des rayons de 6 mm et 39 mm . Cette *figure* montre l'effet de la vitesse de refroidissement \dot{T} sur les cinétiques de transformations de phase. En effet l'intégration de la cinétique de changement de phase le long du chemin thermique, entraîne une évolution de la transformation qui ne correspond pas à des fonctions $y = f(T)$. Cet exemple montre qu'en chaque point de la pièce la cinétique de changement de phase va évoluer dans un espace température-vitesse de refroidissement-temps (TRC), bien que les données initiales soient issues des diagrammes température-temps (TTT), où l'effet de la vitesse de refroidissement n'est pas prise en compte. On en conclut que la fraction transformée dépend du trajet thermique.

7.2.2 Couplage thermique-métallurgie-mécanique

L'analyse complète est menée à partir de la *figure 7.14* qui représente l'évolution de la contrainte axiale en fonction du temps. Parallèlement la *figure 7.15* présente l'évolution de la déformation plastique équivalente et l'évolution de la plasticité de transformation équivalente.

La déformation plastique est concentrée sur le bord du cylindre et il s'établit un profil de contrainte d'origine thermique, où la contrainte en surface suit la limite d'écoulement

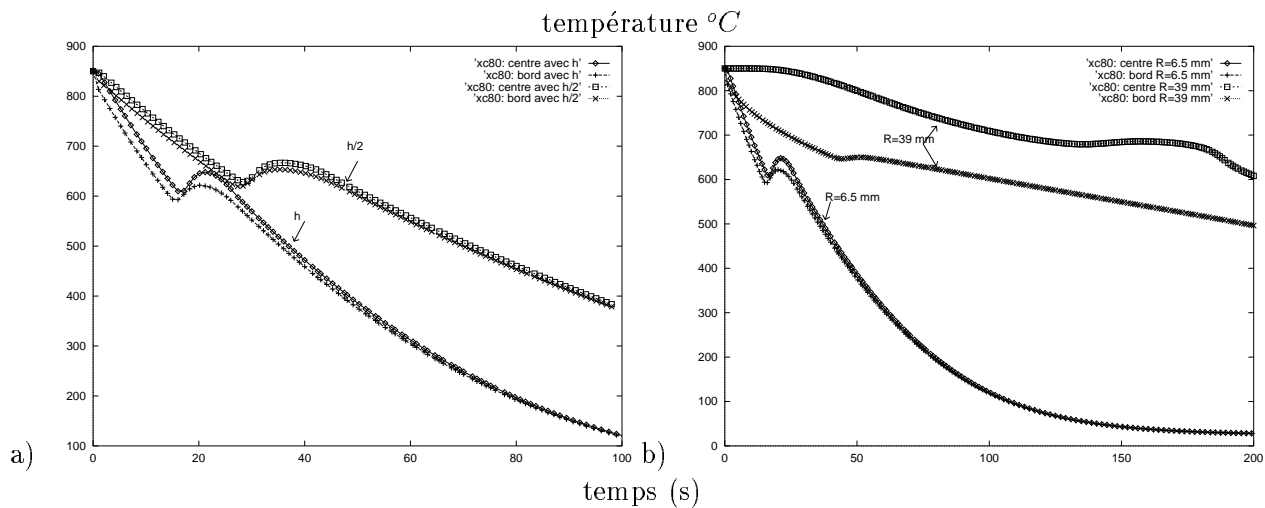


FIG. 7.12 – effet de la vitesse de refroidissement sur la recalescence: a) conditions aux limites variables, b) augmentation du rayon du cylindre

de l'austénite.

L'apparition de la perlite introduit la plasticité de transformation et conduit à une relaxation des contraintes dans le domaine de transformation, et induit des niveaux de contraintes résiduelles élevés.

Les confrontations des calculs 2D et 3D montrent des écarts sur le niveau des contraintes résiduelles attribué aux différences observées sur la transformation de la perlite (figure 7.10).

7.2.3 Couplage contrainte-transformation de phases

Il s'agit de la prise en compte de l'influence des contraintes sur les cinétiques de transformation de phase dont une analyse détaillée peut être trouvée dans [Denis et al.87]. On observe une accélération de la transformation perlitique par l'effet des contraintes internes, ce qui se traduit également par une évolution plus rapide de l'inversion du profil des contraintes.

7.2.4 Conclusion sur les premiers calculs

Nous avons développé un modèle thermo-mécanique qui intègre les différents couplages métallurgiques. Les premiers tests effectués nous ont permis de valider dans des cas simples académiques l'introduction dans le code des différentes lois phénoménologiques qui décrivent les cinétiques de transformation et leurs effets. Sur différentes transformations, nous avons analysé:

- Les effets du couplage métallurgie-loi de comportement qui sont de la première importance pour la prédiction des contraintes résiduelles.
- Les effets de la recalescence qui jouent un rôle important sur l'évolution thermique et régulent par auto-échauffement les transformations de phases.
- Les effets de l'écrouissage qui dans un cas de refroidissement dans la masse avec transformation complète de l'austénite ne semblent pas avoir une grande importance

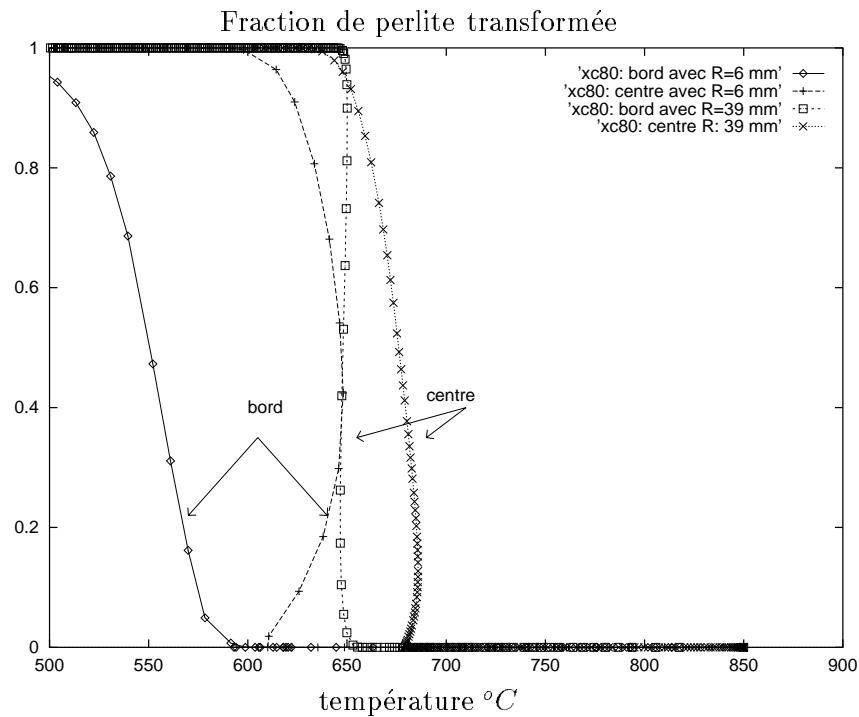


FIG. 7.13 – *effet de la vitesse de refroidissement sur les cinétiques de transformation.*

sur le niveau des contraintes internes.

- Les effets des contraintes internes sur les cinétiques de transformation de phase. Leurs influences ne sont pas négligeables, mais sont du second ordre en comparaison des effets du couplage métallurgie-loi de comportement.

L'ensemble de ces résultats nous permet d'aborder désormais l'étude du refroidissement d'une pièce hétérogène en carbone présentant tous les types de transformation de phases.

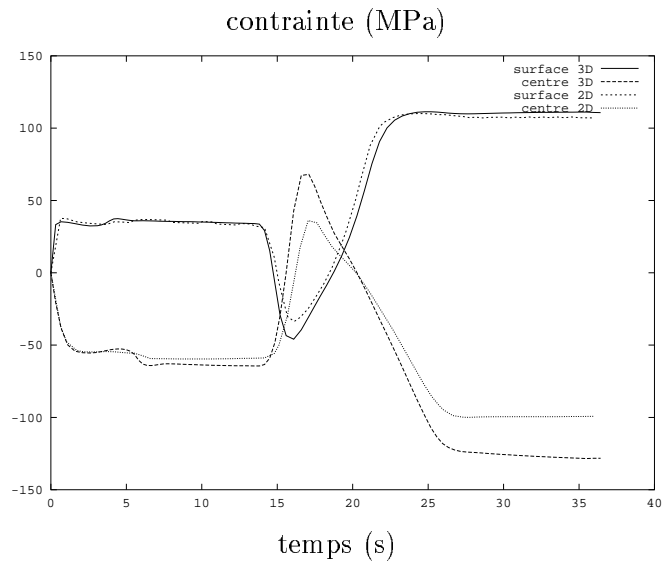


FIG. 7.14 – Contrainte axiale: $\sigma_{zz} = f(t)$, comparaisons calculs 2D et 3D.

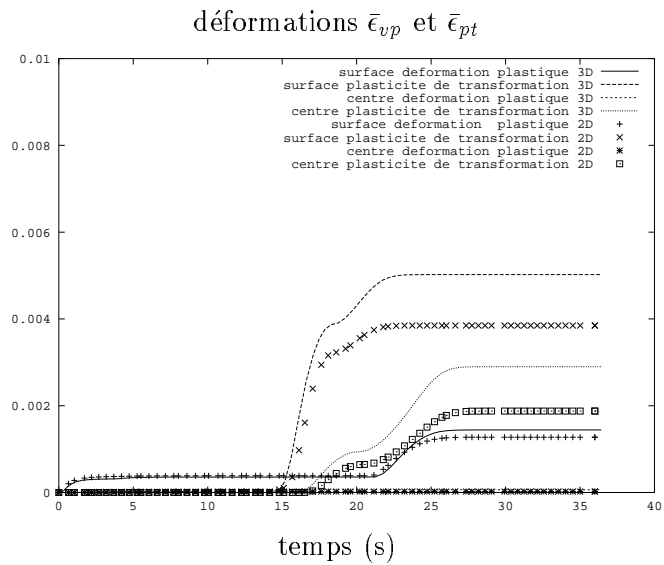


FIG. 7.15 – Évolution de la plasticité de transformation et de la déformation équivalentes dans le temps, comparaisons calculs 2D et 3D.

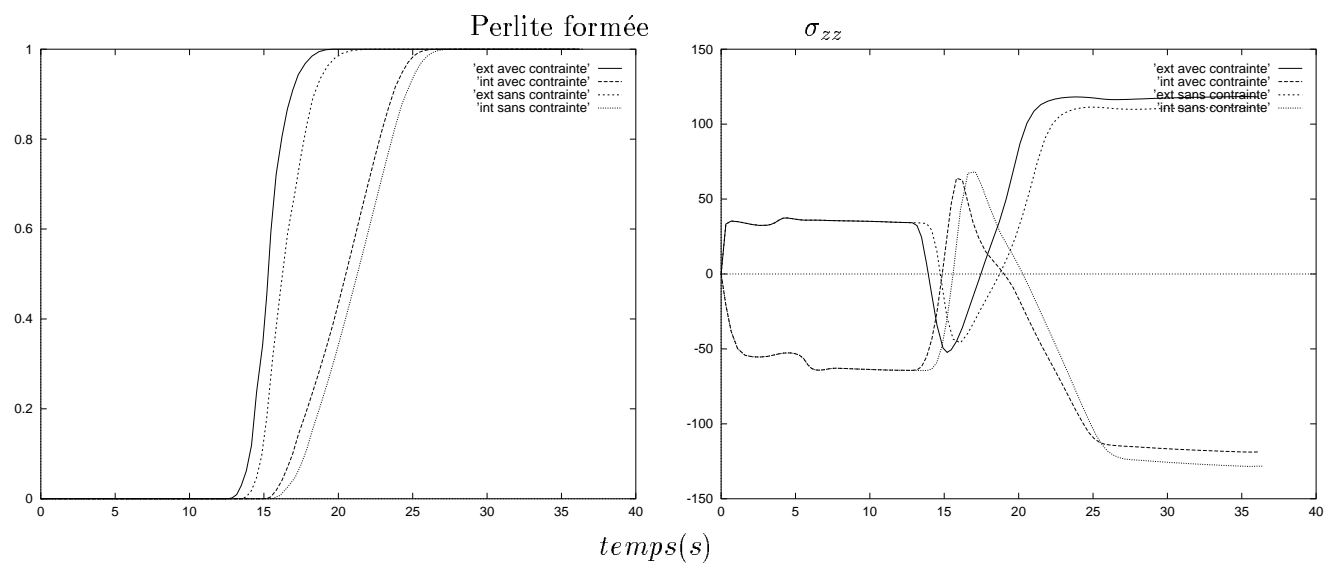


FIG. 7.16 – Influence des contraintes, XC80 3D a) cinétiques, b) modification des contraintes

7.3 Calculs sur cylindre massif: comparaison matériau homogène et hétérogène

Dans cette partie nous comparons les résultats obtenus avec Quest¹ et Forge3. Ces exemples montrent en particulier l'influence de la prise en compte du carbone dans les modules thermiques, métallurgiques, et mécaniques de notre calcul.

– Jeux de données

Un jeu de données correspondant aux valeurs moyennes des aciers (données simplifiées par rapport au comportement réel du matériau) a été mis en place pour les données thermiques, mécaniques, et métallurgiques. L'ensemble du jeu de données mécaniques et thermiques et a été fourni par le LSG2M pour les besoins du test. Ce jeu de données est très largement simplifié par rapport au comportement réel du matériau. Les données sont fonction de la température, et de la teneur en carbone pour chaque phase. Nous avons supposé un écrouissage isotrope $\beta = 0$ avec mémoire de l'écrouissage $\gamma = 1$. Les données métallurgiques concernent un acier bas carbone 0.2%C, dont le diagramme TTT déjà présenté est reporté sur la *figure 5.12*.

– Conditions limites

On considère un cylindre de 40 mm de rayon. Le coefficient de transfert est homogène sur la surface du cylindre, constant et égal à $3000 \text{ W/m}^2 \text{ K}$. Un profil linéaire de carbone depuis 0.2%C au centre jusqu'à 0.6% en surface est imposé le long du rayon du cylindre (*figure 7.17*). Ce profil va engendrer une modification des transformations de phase ainsi que des propriétés mécaniques. Il est intéressant de comparer les résultats avec un calcul en carbone homogène.

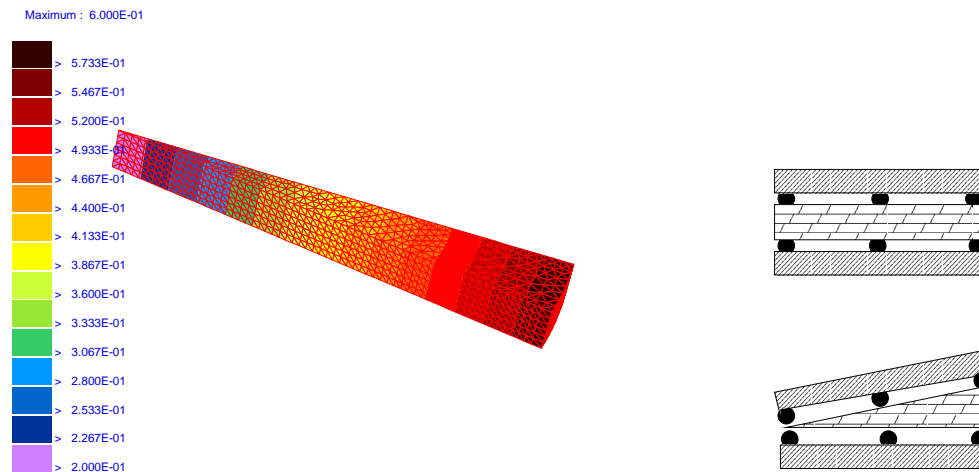


FIG. 7.17 – Représentation de la géométrie utilisée et des conditions aux limites associées. Tranche du cylindre avec profil de carbone imposé, conditions limites mécaniques.

– Paramètres numériques

1. Quest est le logiciel du LSG2M Mines de Nancy.

Pour illustrer l'adaptativité du pas de temps, nous avons tracé son évolution au cours du temps sur la *figure 7.18a*). On remarque que le pas de temps augmente rapidement lorsque le choc thermique diminue, et lors des changements de phases vers, $t = 20$ s, celui-ci s'adapte pour conserver le refroidissement moyen de consigne indiqué. Cela permet de stabiliser le problème et de réussir la convergence globale du couplage thermique-métallurgie-mécanique. En effet sur la *figure 7.18b*) on remarque que le temps CPU pour résoudre le problème reste assez stable. Les changements de phases avec les couplages qu'ils entraînent restent "numériquement maîtrisés".

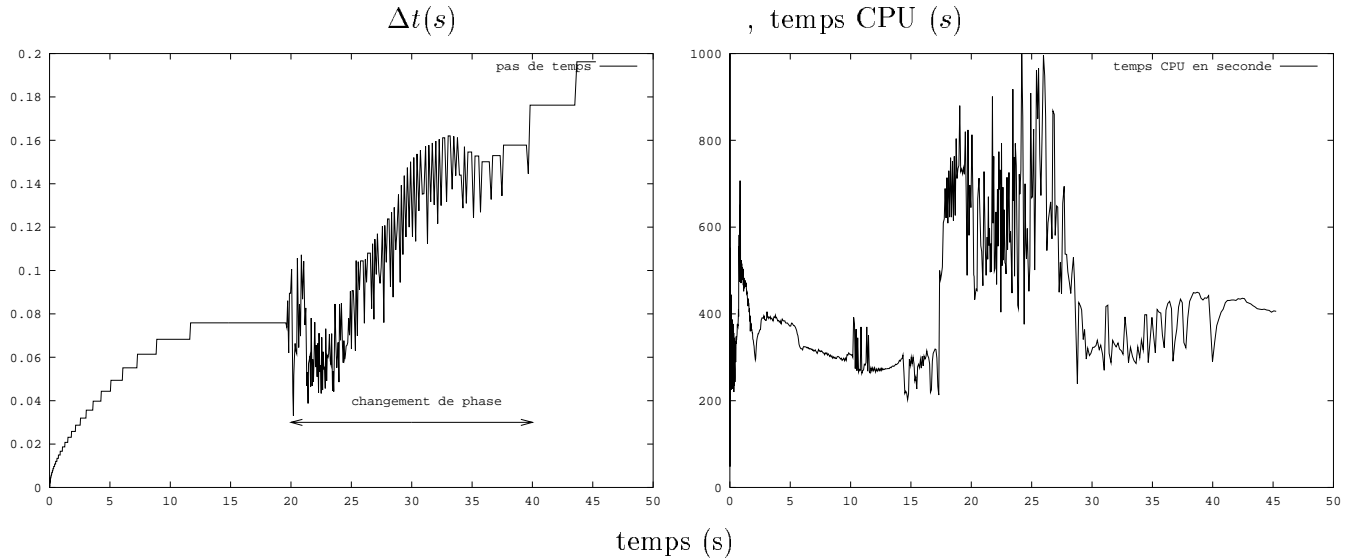


FIG. 7.18 – Évolution a) du pas de temps, b) du temps CPU par incrément, en fonction du temps de la simulation. Simulation correspondant au calcul du cas hétérogène.

– Résultats dans le cas homogène: $C=0.2$

La *figure 7.19* représente la comparaison de l'évolution de la température au centre et en surface du cylindre. Au début du refroidissement, dans le domaine austénitique, les courbes sont très proches. Quand les transformations de phases commencent, on note des écarts entre Quest et Forge3. Les différences se retrouvent également sur le total de phases transformées en surface *figure 7.20a*), et au centre *figure 7.20b*). L'écart observé sur les transformations ferritiques et bainitiques génère une différence sur la transformation de la martensite, dernière phase à se transformer. Nous avons vu que le module de transformation de phase donne les mêmes résultats pour les deux codes lorsque la température est identique (par exemple en température imposée). Les méthodes de résolution de la thermique sont différentes dans Quest (différences finies) et Forge3 (éléments finis) ceci peut expliquer les écarts observés pour une simulation avec un cas de choc thermique fort.

La *figure 7.21* représente l'évolution de la contrainte axiale obtenue à la surface et au centre en fonction du temps avec les deux codes. Au début du refroidissement, la surface se refroidit plus rapidement que le centre entraînant une contrainte de compression au centre et de traction en surface. Cette contrainte augmente avec le gradient thermique jusqu'à la première transformation de phase. À $t = 2.8$ s, la transformation ferritique à la surface conduit à une compression de la surface. Ensuite la transformation bainitique conduit la compression de surface dans un second temps. À $t = 13$ s, la compression à la surface diminue à cause du début de transformation

au centre du cylindre qui crée une expansion du coeur. A $t = 21s$, la transformation ferritique au centre entraîne une relaxation, et la transformation bainitique au centre continue à mettre le coeur en compression. Au bout de 60s, les transformations sont pratiquement terminées sur tout le rayon du cylindre, et seul le gradient thermique est à nouveau responsable de l'évolution des contraintes internes. Toutes ces évolutions complexes sont aussi fonction de la distribution des déformations plastiques qui conduit au profil de contraintes résiduelles. Les différences dans le niveau des contraintes sont essentiellement dues à l'écart observé sur les cinétiques de transformation de phases liées aux gradients thermiques différents pour les deux codes.

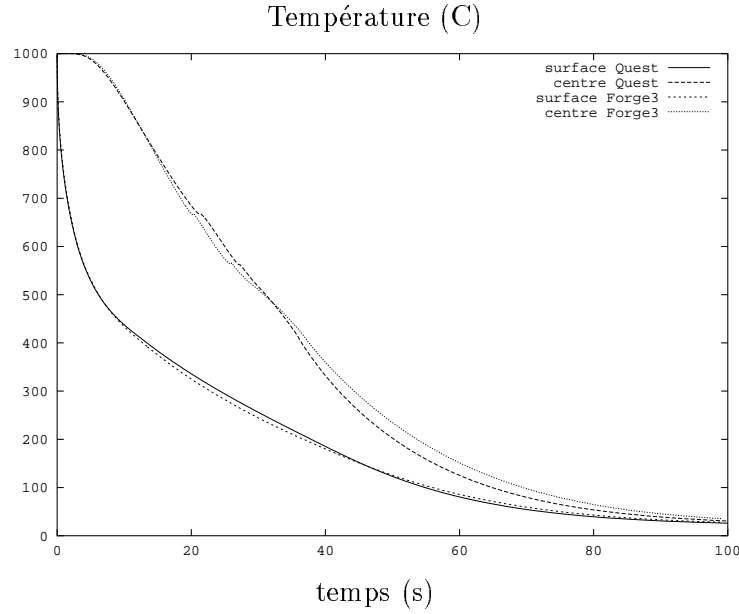


FIG. 7.19 – Comparaison de l'évolution des températures à la surface et au centre calculées par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre homogène.

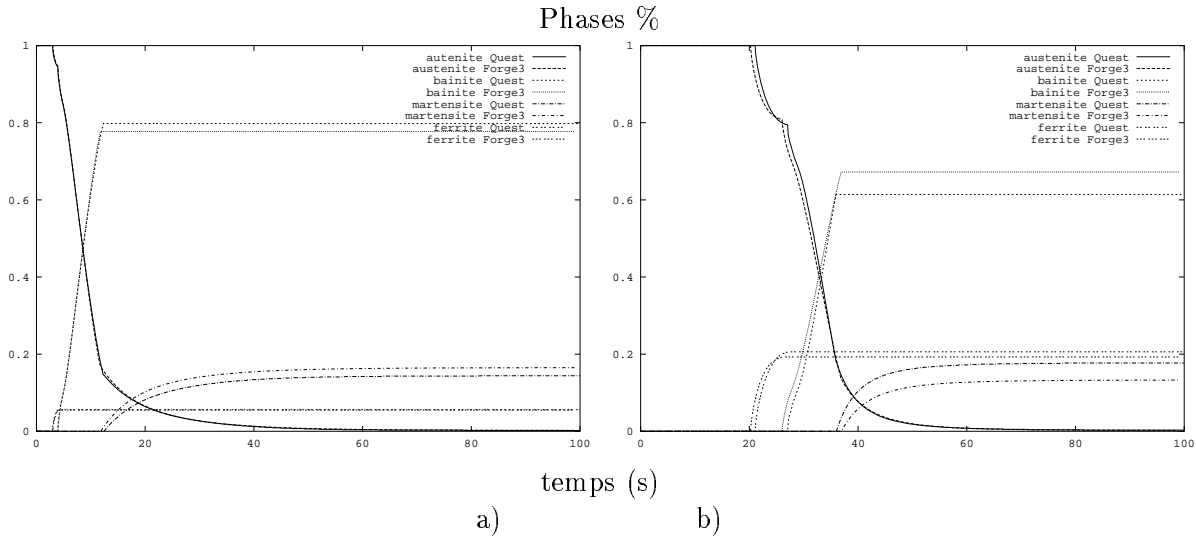


FIG. 7.20 – Comparaison de l'évolution des transformations de phases a) à la surface, b) au centre, calculée par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre homogène.

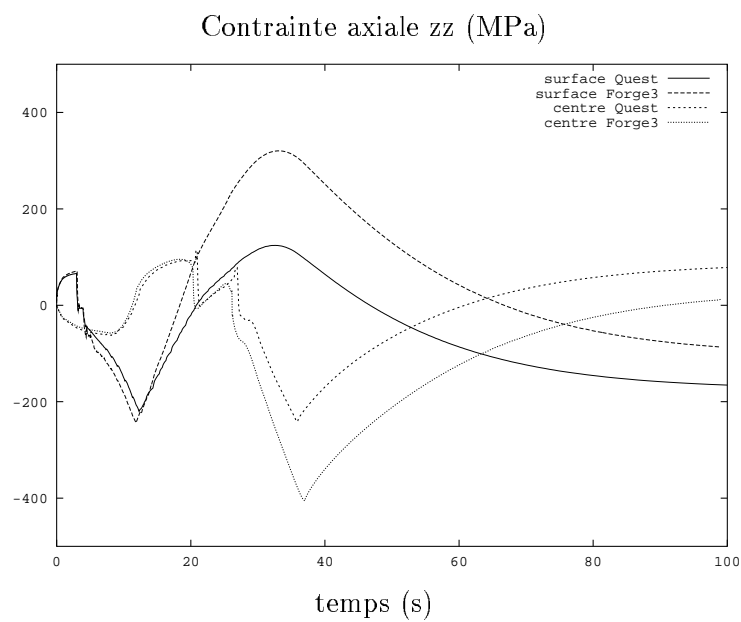


FIG. 7.21 – Comparaison de l'évolution de la contrainte axiale à la surface et au centre calculée par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre homogène.

– Résultats dans le cas hétérogène: $c=0.2-0.6$

La *figure 7.22* représente la comparaison de l'évolution de la température au centre et en surface du cylindre. La même remarque que pour le cas homogène pourra être faite (*figure 7.19*). Au centre la concentration en carbone de $0.2\%C$ est identique au cas précédent, on observe pratiquement les mêmes transformations de phases (*figure 7.23*). A la surface la concentration en carbone est plus importante de $0.6\%C$ et on observe seulement une transformation martensitique en surface (*figure 7.24*).

L'évolution de la contrainte axiale est montrée sur la *figure 7.25*. L'évolution est complexe et résulte des transformations de phases différées dans le temps le long du rayon, du gradient thermique, et des hétérogénéités des déformations plastiques. Les résultats obtenus en contraintes résiduelles (*figure 7.26*) avec Quest et Forge3 sont satisfaisants, et les écarts sont, comme dans le cas homogène, attribués aux gradients thermiques couplés aux transformations de phases.

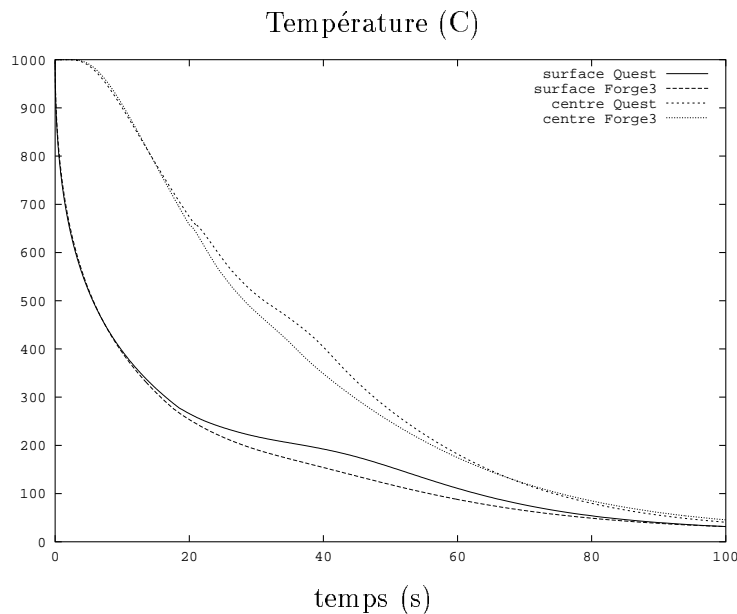


FIG. 7.22 – Comparaison de l'évolution des températures à la surface et au centre calculée par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre hétérogène.

– Conclusion sur la prise en compte du carbone

Au travers de ces résultats de simulation, nous avons mis en évidence l'influence d'une variation locale en carbone sur les évolutions de la température, des changements de phases, et des contraintes internes.

Ces exemples permettent de valider l'implémentation dans Forge3 des cinétiques de transformation de phases couplées avec l'effet de la composition en carbone. Les comparaisons entre Quest et Forge3 sont satisfaisantes. Il est difficile d'obtenir des résultats identiques à cause des différences entre les méthodes numériques thermiques (différences finies/éléments finis), mécaniques (formulation en déplacement à un champ/formulation mixte en vitesse pression), différentes pour les deux codes.

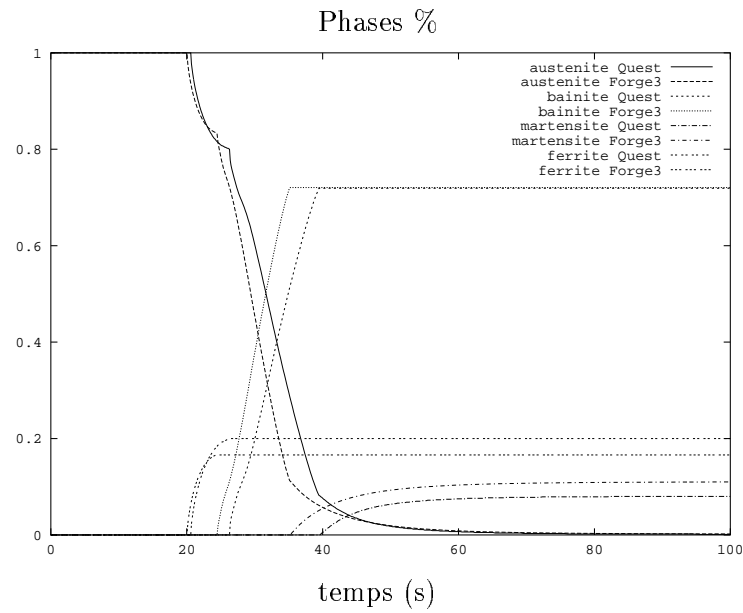


FIG. 7.23 – Comparaison de l'évolution des transformations de phases au centre calculée par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre hétérogène.

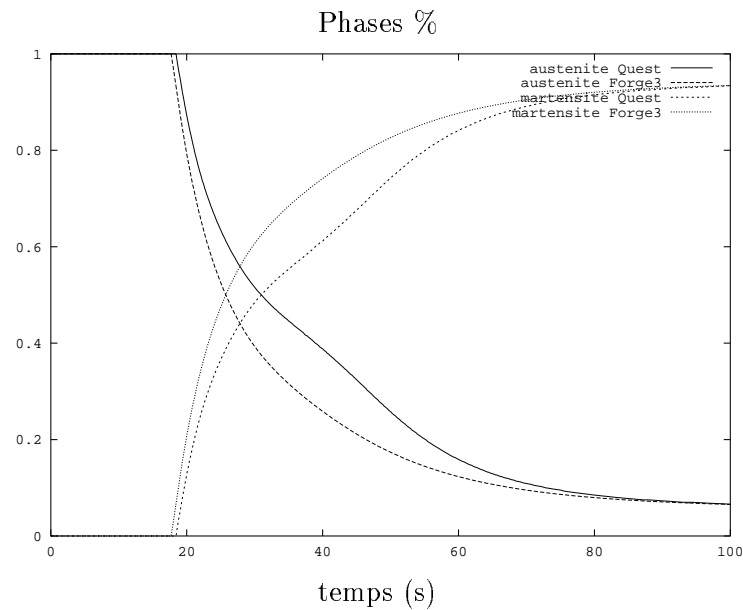


FIG. 7.24 – Comparaison de l'évolution des transformations de phases à la surface calculée par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre hétérogène.

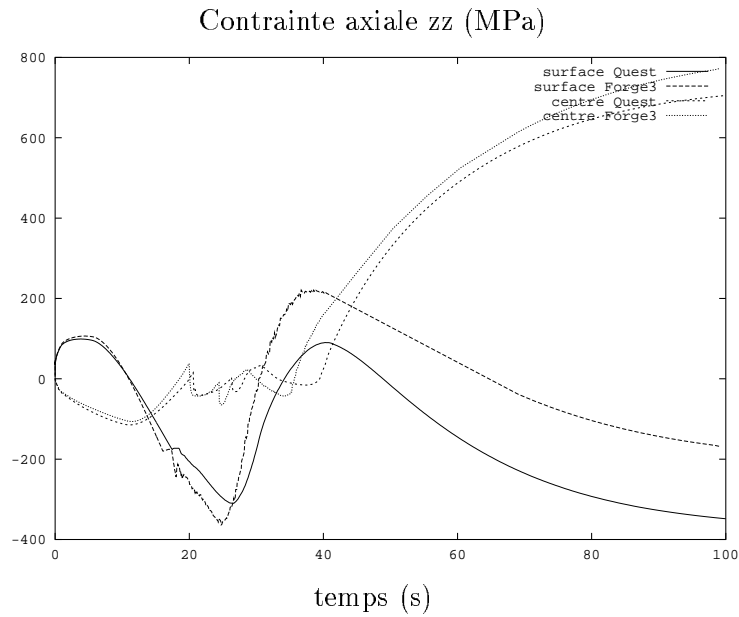


FIG. 7.25 – Comparaison de l'évolution de la contrainte axiale à la surface et au centre calculée par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre hétérogène.

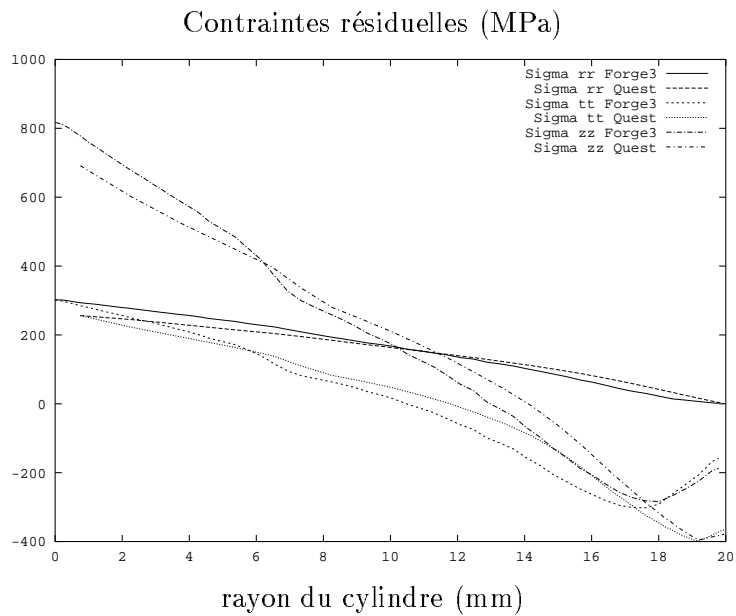


FIG. 7.26 – Comparaison de l'évolution des contraintes résiduelles calculées par Quest et Forge3 dans le cas du cylindre hétérogène.

7.4 Exemples industriels de simulations numériques

L'objectif de cette partie est de montrer la faisabilité du modèle utilisé pour simuler dans des conditions proches de la réalité le traitement thermique de pièces complexes. Ces exemples ont été étudiés avec les partenaires industriels du projet et les données utilisées pour la simulation sont confidentielles. Notre objectif est de montrer qu'une simulation tridimensionnelle fournit l'ordre de grandeur, la tendance, et permet de mieux comprendre la genèse des contraintes et des distorsions au cours du traitement thermique.

7.4.1 Calcul sur coupon de rail

Le refroidissement du rail a fait l'objet d'une étude commune entre l'IRSID, SOGE-RAIL, le CEMEF, et le LSG2M [Colonna92]. Le rail est en acier eutectoïde faiblement allié et l'ensemble des valeurs du jeu de données nous ont été fournies par l'IRSID. Les données d'entrée pour le modèle thermique sont les propriétés thermophysiques de l'austénite et de la perlite, fonctions de la température.

Les données pour le modèle métallurgique sont les courbes TTT de transformation de la perlite, la micro-dureté de la perlite en fonction de la température de formation, l'enthalpie de transformation de la perlite.

Les données mécaniques sont les évolutions avec la température du module d'Young, des coefficients définissant la contrainte d'écoulement, pour l'austénite et la perlite. Le coefficient de dilatation, le coefficient de changement de phase, le coefficient de plasticité de transformation. Pour le calcul mécanique, nous avons supposé une restauration au cours de la transformation. Tous les couplages thermique-métallurgique-mécanique sont pris en compte.

Les conditions aux limites sont homogènes, le coefficient de transfert a été déterminé [Perrin et al.97]: $h = 75 W/m^2 K$, cette condition s'appliquant sur tout le contour du profil.

– Analyse thermique-métallurgie

Les analyses que nous présentons sont conduites à partir des évolutions en quelques points caractéristiques de la section du rail (*figure 7.27*).

Le maillage utilisé est montré sur la *figure 7.28*. Nous avons utilisé un maillage structuré pour définir des tailles de mailles petites dans les zones de peau afin d'absorber le choc thermique.

Les évolutions thermiques et métallurgiques des quatre points caractéristiques (*figure 7.27*) sont représentées sur les *figures 7.29* et *7.30*. Le changement de phase apparaît d'abord à l'extrémité du patin (point 4), le coeur du champignon est la dernière zone à se transformer (point 1). On notera sur les courbes de refroidissement une recalescence due à la transformation perlitique.

– Analyse mécanique

L'analyse mécanique est globale, et s'effectue à partir de l'évolution de la flèche du rail au cours du refroidissement. Cette évolution est la résultante de l'équilibre des contraintes sur la section du rail, qui évoluent au cours du refroidissement en

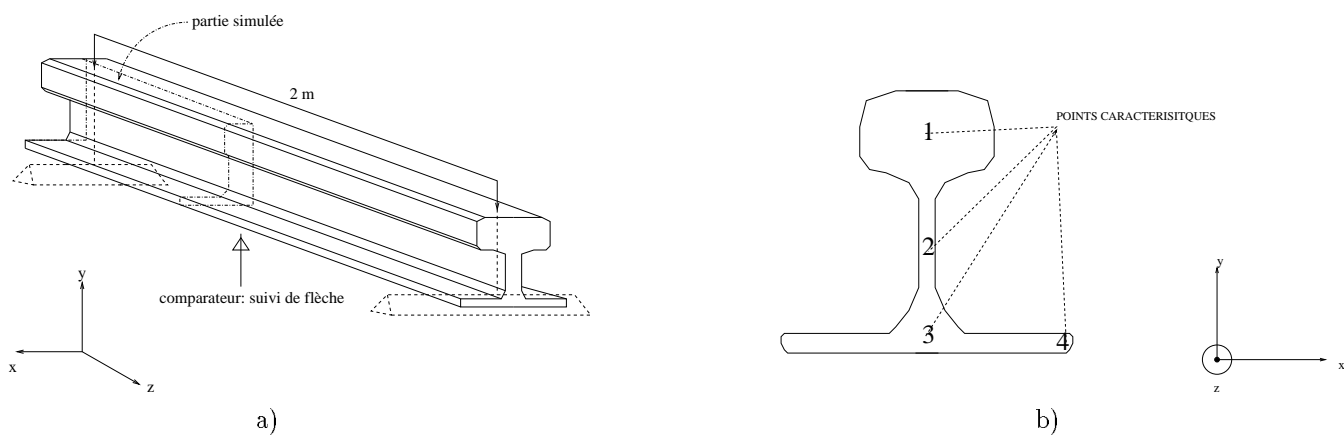


FIG. 7.27 – a) Schéma du dispositif expérimental [Perrin et al.97]; b) les points caractéristiques de la section.

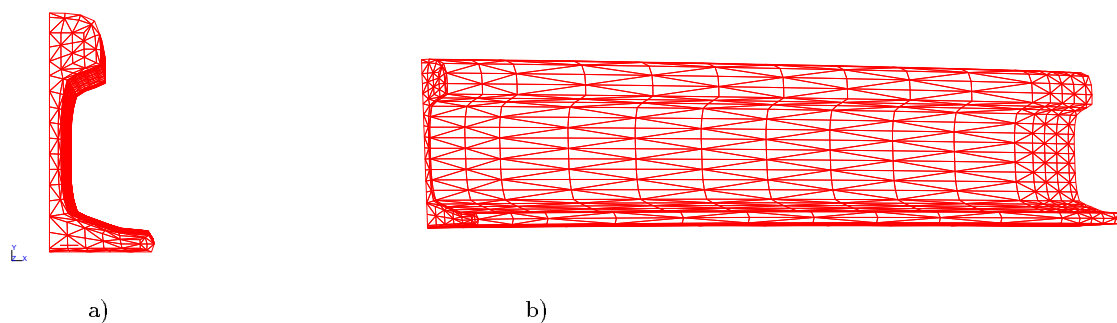


FIG. 7.28 – Refroidissement du rail. a) section , b) rail.

fonction des changements de phases. La comparaison avec l'expérience de l'évolution de la flèche au cours du temps donne une très bonne corrélation (*figure 7.31*). Un grossissement en début de refroidissement (*figure 7.33*) montre un décalage entre la prévision et la mesure, la variation reste bien reproduite. L'évolution de la flèche est peu sensible au type d'écrouissage isotrope ou cinématique. En effet le matériau subit une inversion de chargement pendant la transformation, la restauration de la déformation plastique annule les effets cinématiques. De manière générale pour une transformation complète dans la masse (comme c'est le cas pour le rail) l'effet du type d'écrouissage est négligeable [Denis97].

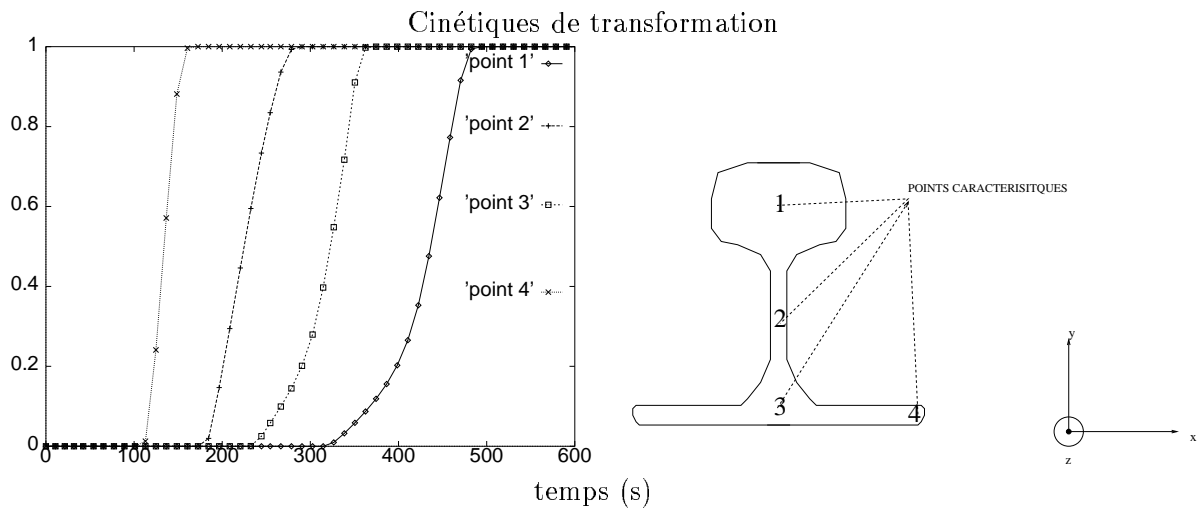


FIG. 7.29 – Évolutions de la transformation de la perlite.

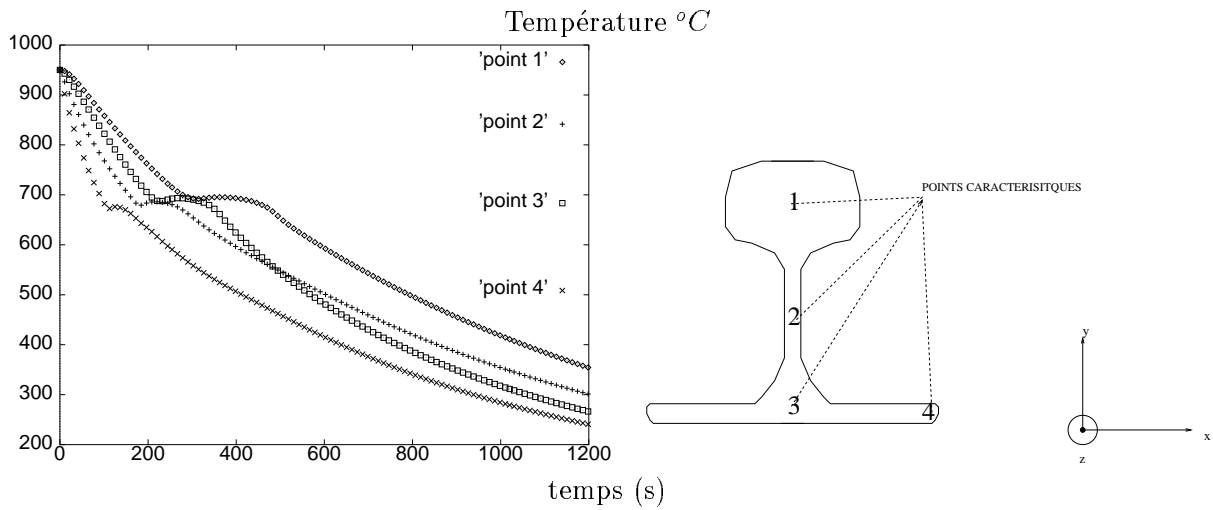


FIG. 7.30 – Évolutions des températures.

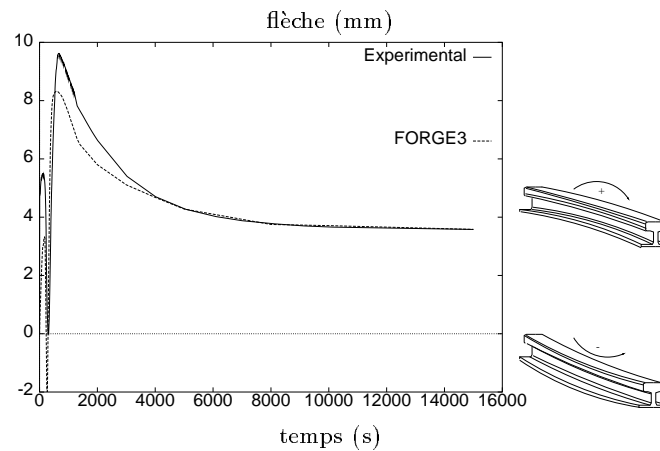


FIG. 7.31 – Confrontation entre flèche calculée et mesurée expérimentalement [Perrin et al.97]. Mesure IRSID.

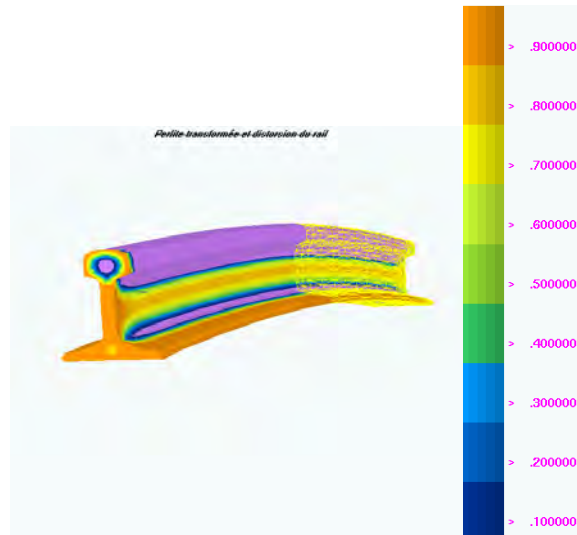


FIG. 7.32 – Illustration de la flexion du rail au cours de la simulation en fonction de la transformation de la perlite. Flèche $\times 10$.

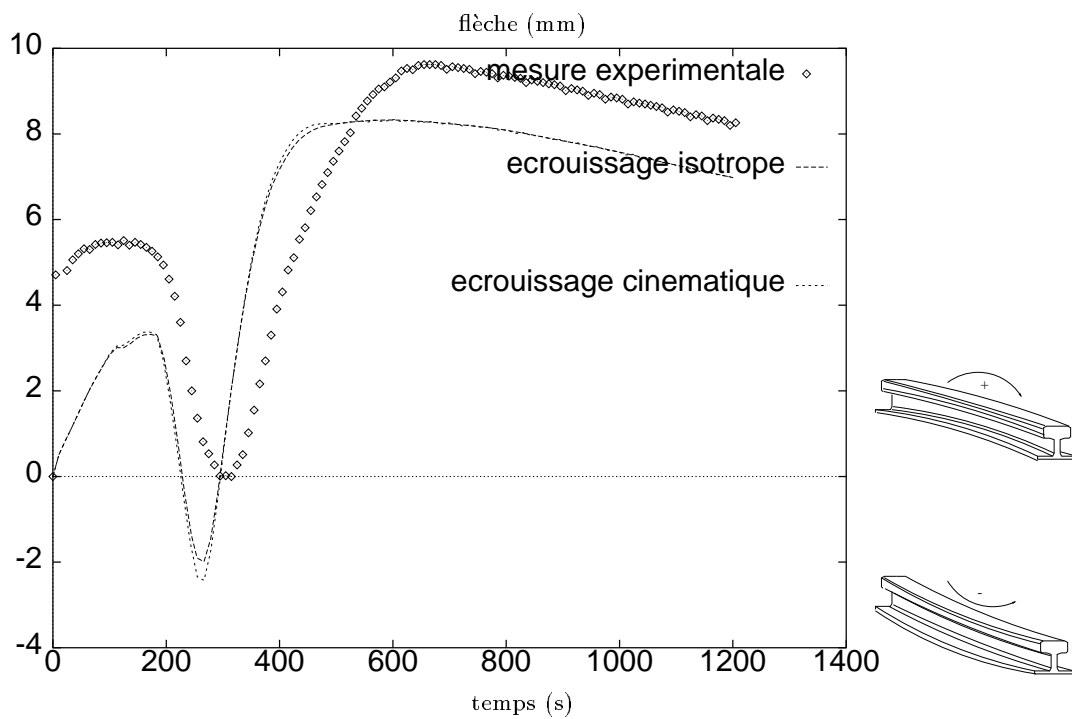


FIG. 7.33 – Comparaison de l'évolution de la flèche en fonction du type d'écrouissage. Mesure IRSID.

7.4.2 Calcul sur un pignon automobile

Ce calcul correspond à la simulation d'un pignon automobile PSA (*figure 7.34*). La nuance de l'acier est 27XXX, l'acier subit plusieurs étapes de cémentation par auto-diffusion avant la trempe afin de générer un gradient de carbone dans la zone de la peau de la dent. Les conditions aux limites thermiques ont été définies par PSA à partir de thermocouples placés dans la pièce, et par calculs des mouvements de fluide avec Fluent. Le coefficient de transfert évolue d'un facteur 1 à 2 entre le sommet de la dent et le reste de la pièce.

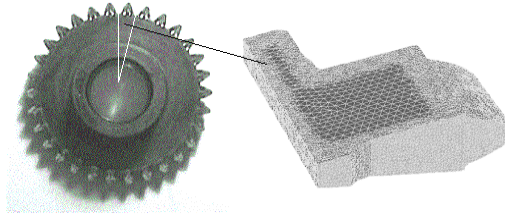


FIG. 7.34 – Pignon et dent simulée. Maillage anisotrope pour la simulation de la diffusion du carbone.

– Analyse chimique: cémentation/auto-diffusion

Pour simuler les étapes de cémentation et d'auto-diffusion, nous avons utilisé des données bibliographiques pour les valeurs du coefficient de diffusion en fonction de la température et de la teneur en carbone [Barralis et al.] :

$$D_c^\gamma = [0.07 + 0.06C] \exp\left(\frac{-16000}{T}\right), \text{ en } cm^2.s^{-1} \quad (7.2)$$

Les résultats des étapes de cémentation et d'auto-diffusion sont montrés sur les *figures 7.35, 7.36* avec le profil de carbone mesuré.

Il est difficile d'un point de vue numérique de concilier un maillage très fin pour la diffusion afin de capter le gradient de carbone, et un maillage mécanique plus grossier pour ne pas avoir des coûts de calcul énormes. Ceci explique que le gradient de carbone en peau ne soit pas régulier. Pour un calcul de diffusion seul, un maillage plus fin serait plus satisfaisant. Le gradient de carbone généré va être utilisé pour modifier les cinétiques de transformations de phases au cours du refroidissement.

– Analyse thermique-métallurgie

Le gradient de carbone établi modifie la nature du matériau et ses transformations de phases. Par exemple sur la *figure 7.37a* on représente le diagramme TRC du 27XXX recalculé par le modèle à partir du diagramme TTT expérimental (données PSA). Sur la *figure 7.37b* on a représenté le diagramme TRC du 60MC5 recalculé par le modèle à partir du diagramme TTT expérimental de base du 27XXX, le 60XXX représente l'acier obtenu en peau par la cémentation.

La forte teneur en carbone a pour conséquences de privilégier une transformation martensitique dans les zones cémentées, et d'obtenir de l'austénite résiduelle. Ainsi

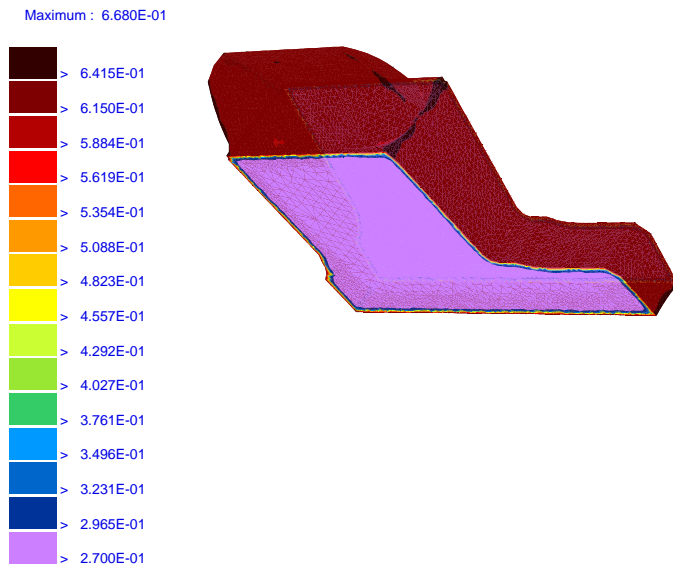


FIG. 7.35 – Profil de carbone sur le pignon après le procédé cémentation/auto-diffusion

après trempe le profil d'austénite résiduelle calculé est comparé avec celui mesuré (figure 7.38).

– Analyse mécanique

L'évolution de la contrainte yy dans la zone cimentée et sous la zone cimentée est représentée sur la figure 7.39. Sur la même figure, on a représenté les changements de phases responsables de la modification des contraintes.

Le cœur de la pièce qui contient une faible concentration de carbone se transforme, alors que la zone cimentée reste austénitique. Cette transformation de phase s'accompagne d'une augmentation de volume du cœur de la pièce, et l'austénite du domaine cimenté doit se déformer plastiquement pour assurer l'équilibre mécanique de l'ensemble. Durant cette étape le cœur est en compression, alors que la zone cimentée est en traction. En fin de refroidissement, c'est le domaine cimenté qui se transforme en martensite. L'expansion volumique de la surface est limitée par le cœur déjà transformé, et conduit à une forte mise en compression de la zone cimentée et à des contraintes de traction dans le cœur.

Sur la figure 7.40 on représente une vue globale de la contrainte yy , la zone cimentée est en compression, le cœur de la pièce est en traction.

La contrainte de la zone cimentée présente une mise en compression supérieure aux valeurs expérimentales connues, qui sont de l'ordre de 600 MPa au lieu des 1000 MPa obtenus. Cet écart peut être attribué à un phénomène d'auto-revenu de la martensite. Le refroidissement est faible dans le domaine martensitique, et l'auto-revenu peut se traduire par un changement de volume associé à la transformation martensitique plus faible que celui pris en compte dans le modèle [Mey97]. Nous avons effectué une simulation en prenant en compte une déformation de transformation martensitique plus faible de l'ordre de 20 %. Nous obtenons ainsi une diminution des niveaux

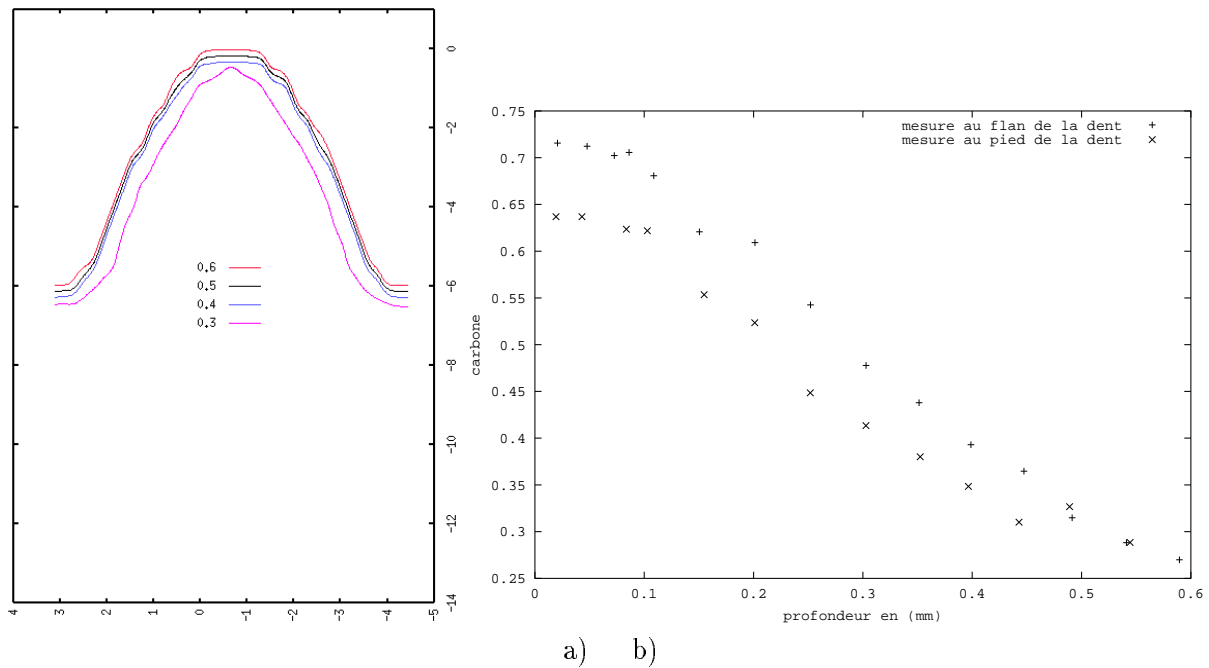
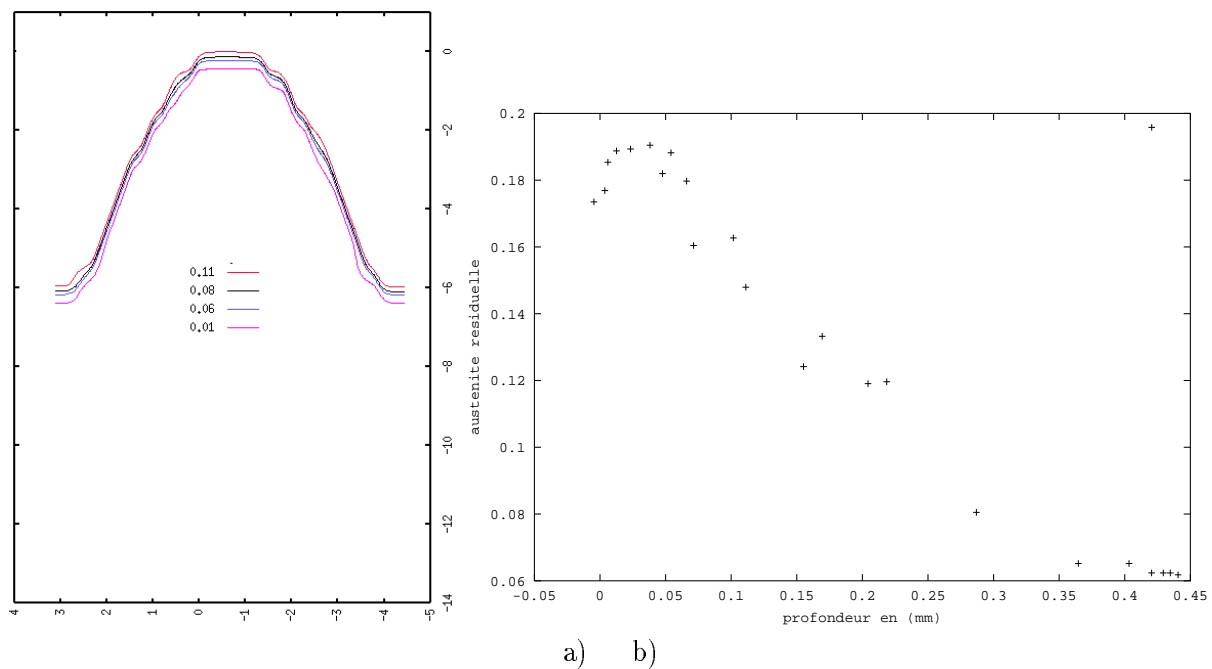
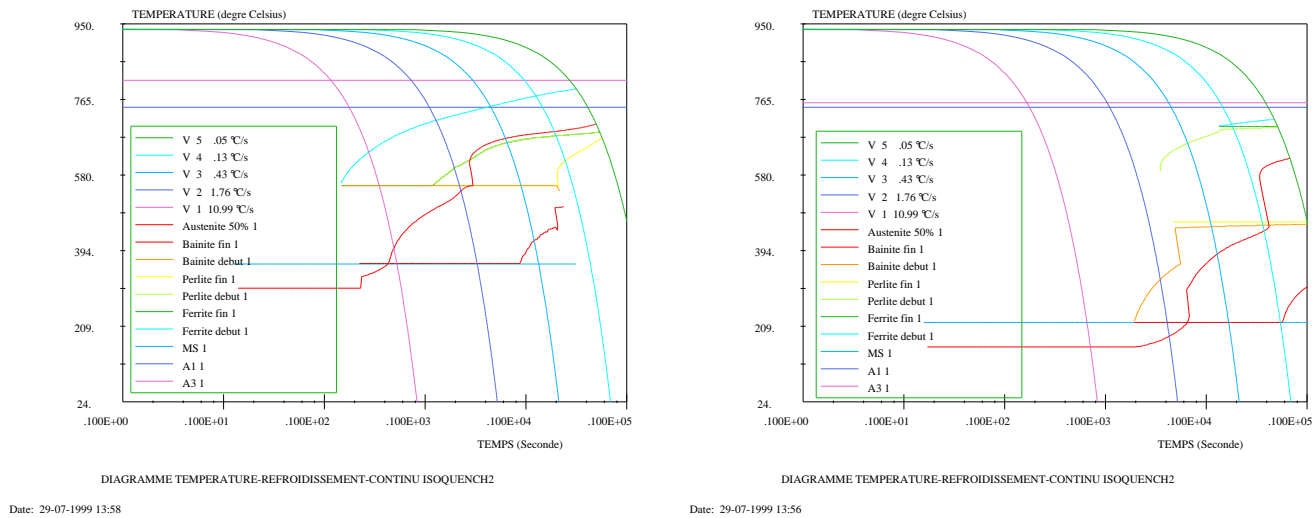


FIG. 7.36 – Confrontation entre le profil de carbone a) calculé dans la dent du pignon: coupe de la dent en mm avec lignes d'iso-valeurs en carbone, b) profil mesuré. Mesure PSA.

de contraintes en compression comme l'illustrent la *figure 7.41*. Ainsi le niveau des contraintes yy dans la zone cimentée atteint la valeur des 600 MPa attendus.

Une confrontation du profil de la contrainte yy expérimentale et calculée dans l'extrême zone de la peau de la dent du pignon cimentée est représentée sur (*figure 7.42*).

L'ordre de grandeur est observé (ici l'échelle est arbitraire pour conserver la confidentialité des données) mais on ne reproduit pas exactement le profil expérimental. La taille de maille qui est représentée par la distance entre deux points sur la *figure 7.42* ne permet pas d'atteindre les variations expérimentales. Un maillage plus fin en 3D est impossible, on utilise déjà un maillage anisotrope pour limiter le nombre d'éléments, la capacité de calcul actuelle ne permet pas d'obtenir un maillage satisfaisant. Rappelons que le jeu de données utilisé est approximatif, et il est très intéressant d'obtenir de tels résultats avec une analyse simplifiée. Cette paramétrisation peut servir de base de données pour une première simulation, elle peut être ensuite affinée en fonction de la précision désirée sur les calculs.



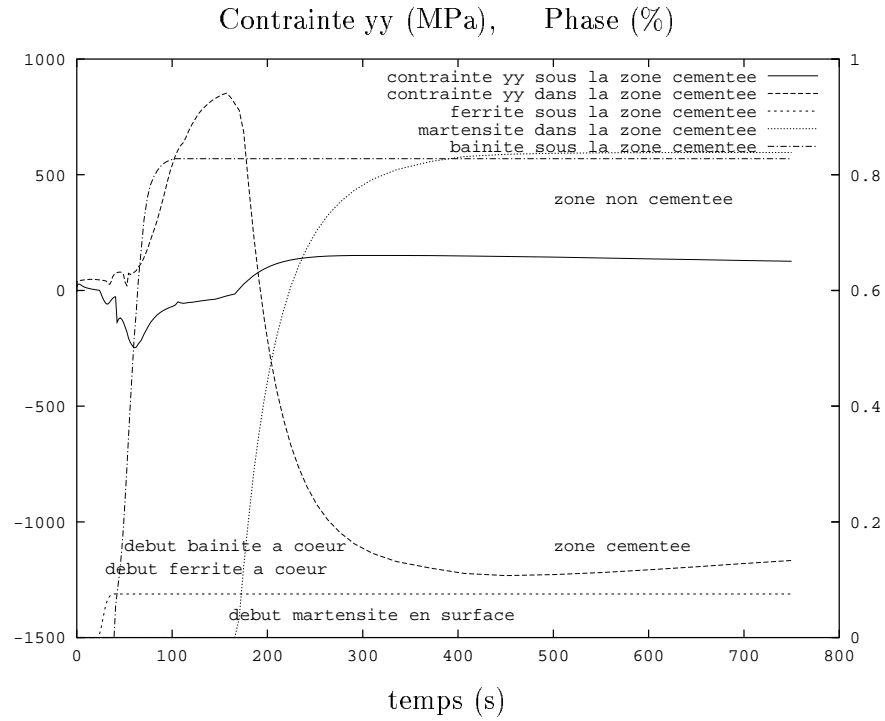


FIG. 7.39 – Évolution de la contrainte yy en fonction du temps et des transformations de phases dans la zone cimentée et sous la zone cimentée.

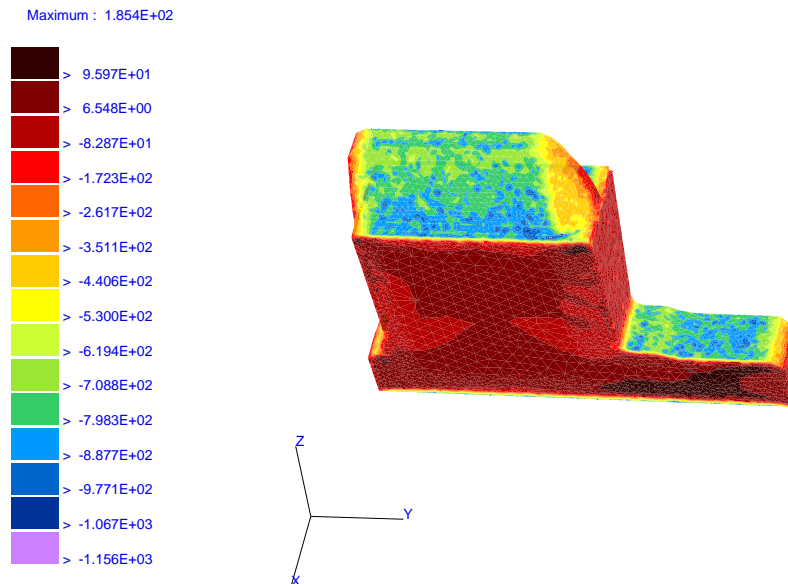


FIG. 7.40 – Illustration des résultats en contrainte yy sur l'ensemble du pignon.

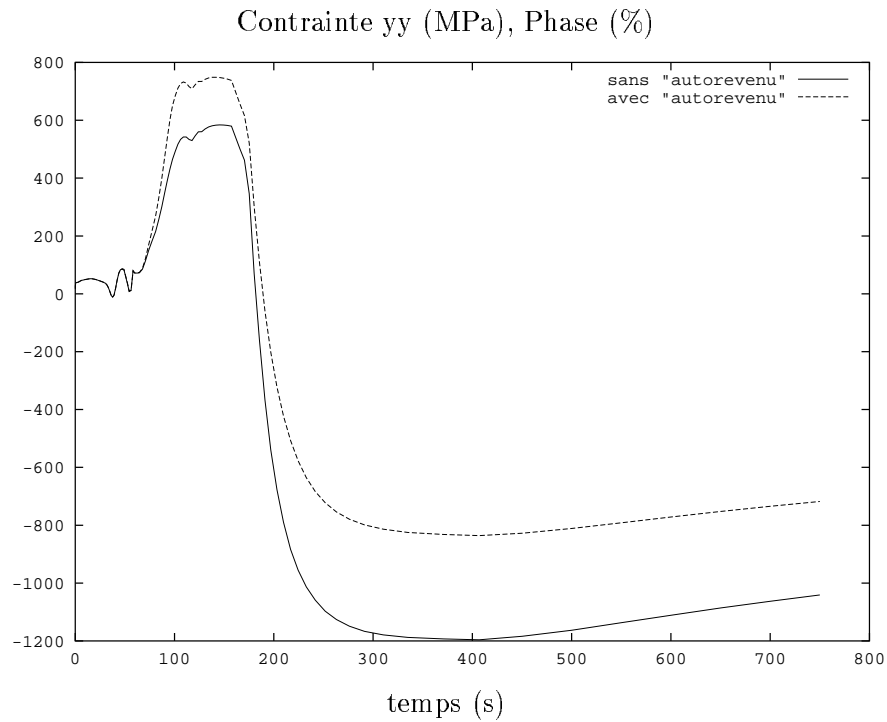


FIG. 7.41 – Évolution de la contrainte yy en fonction du temps avec et sans “auto-revenu”.

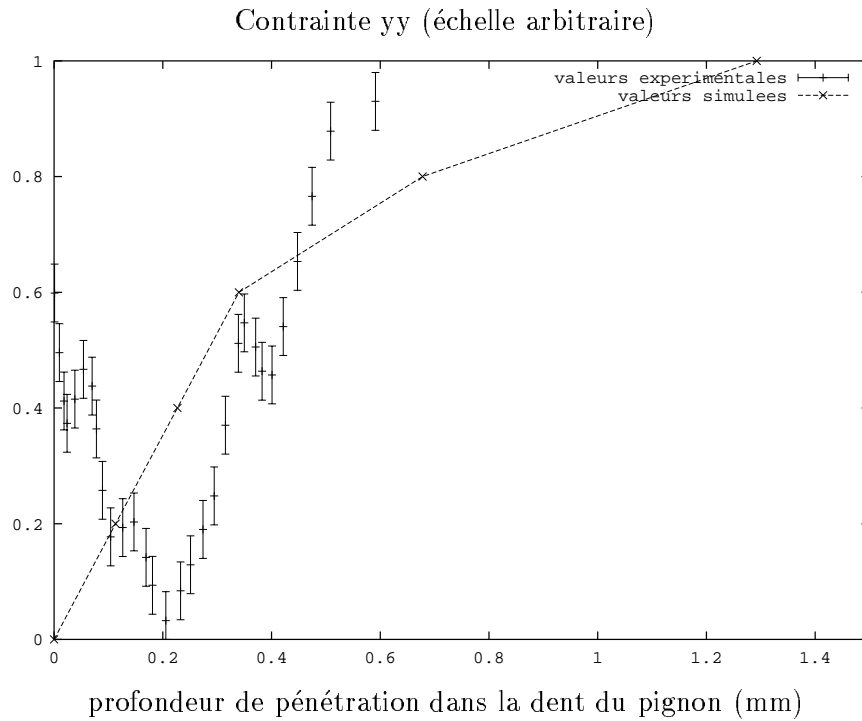


FIG. 7.42 – Confrontation des contraintes résiduelles yy expérimentales et simulées. Mesures confidentielles PSA.

7.4.3 Calcul sur une pièce massive de grande dimension

Ce cas test d'application concerne la prise en compte d'une ségrégation en carbone d'une pièce massive issue de la fonderie. En effet la réalisation de pièce massive par la voie fonderie entraîne une hétérogénéité en carbone au cours de la solidification.

La pièce simulée présente une zone ségrégée dans une région à coeur (*figure 7.43*, pièce Creusot-Loire-Industrie). Il est alors intéressant d'étudier l'influence des ségrégations en carbone sur les cinétiques de transformations de phases, ainsi que sur l'état des contraintes résiduelles. La pièce étant axi-symétrique la comparaison avec le modèle 2D Forge2© est possible.

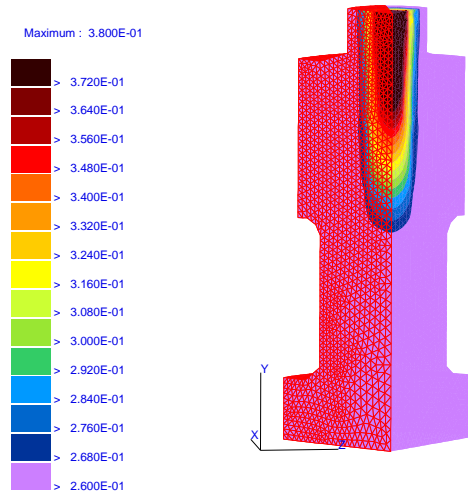


FIG. 7.43 – Arbre simulé, avec ségrégation en carbone et maillage utilisé. Pièce CLI, Rayon moyen de la pièce égal à 2 mètres.

– données utilisées

Le refroidissement est décomposé en une trempe à l'eau avec un coefficient de transfert thermique de $1500 W/m^2 K$ homogène sur la surface libre de la pièce, suivi d'un refroidissement à l'air libre avec un coefficient de transfert thermique de $25,5 W/m^2 K$ homogène sur la surface libre de la pièce (coefficients déterminés par CLI). L'acier considéré est un 28NCD6 dont le diagramme TRC recalculé par le modèle à partir du diagramme TTT (données confidentielles CLI) est montré sur la *figure 7.44*.

Les données thermophysiques et mécaniques correspondent au jeu de valeurs moyennes fournies par le LSG2M.

Pour ce calcul nous avons utilisé en 3D la résolution thermique Taylor Galerkin discontinue, suivi de la thermique Galerkin avec méthode asynchrone lorsque les forts gradients thermiques sont établis. Le changement s'effectue typiquement lorsque le pas de temps asynchrone est moins de dix fois plus grand que le pas de temps réel (nous renvoyons le lecteur au chapitre numérique concernant la résolution de l'équation de la chaleur).

– résultats thermo-métallurgiques

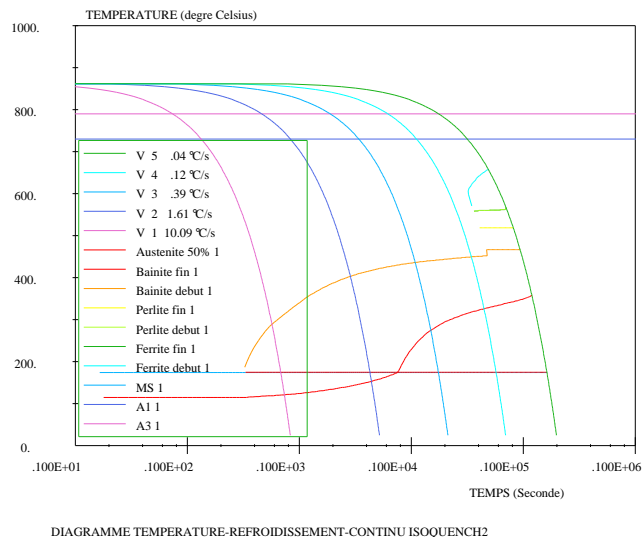


FIG. 7.44 – Diagramme *TRC* recalculé à partir diagramme *TTT* de l'acier 28NCD6. Données *CLI*.

Sur les figures 7.45 et 7.46 sont représentées les comparaisons des changements de phases pour les calculs 2D et 3D en fin de refroidissement à l'eau et à l'air. La microstructure finale est influencée par la présence de la ségrégation; la ferrite est moins présente dans les zones à forte teneur en carbone, qui sont transformées essentiellement en bainite. On notera une très bonne corrélation entre les calculs obtenus par le code 2D et 3D.

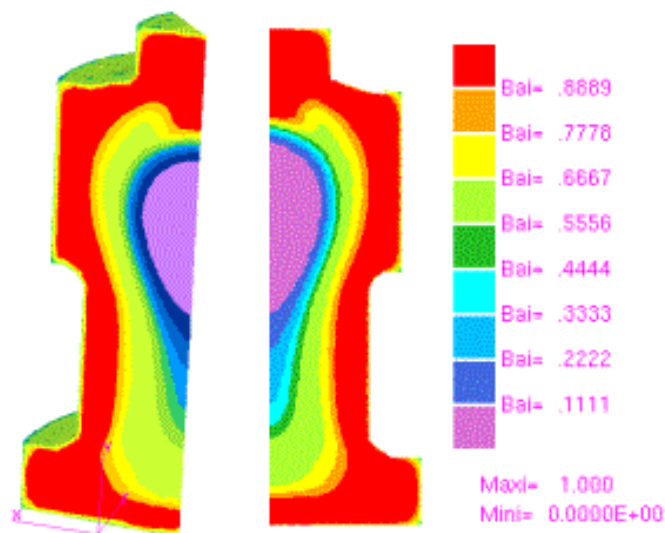


FIG. 7.45 – Transformation bainitique en fin de refroidissement, comparaison des calculs 2D et 3D.

– résultats mécaniques

Sur la figure 7.47 est représentée la contrainte résiduelle ortho-radiale pour les calculs 2D et 3D. On note un léger décalage entre les résultats 2D et 3D, dans l'ensemble le profil de contrainte est similaire.

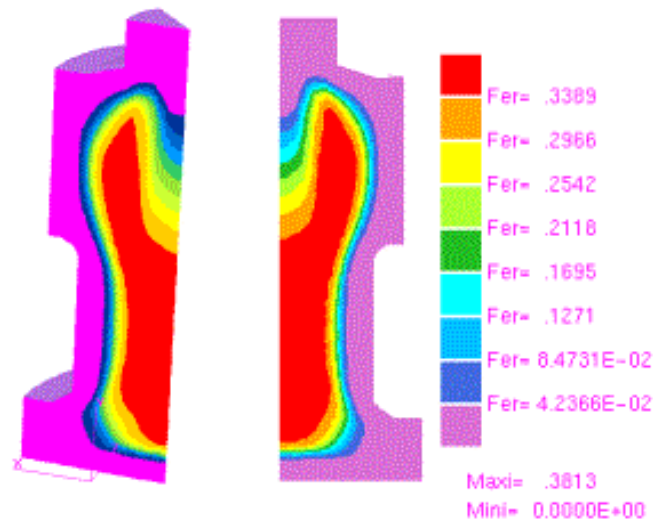


FIG. 7.46 – Transformation ferritique en fin de refroidissement, comparaison des calculs 2D et 3D.

Cette pièce présente une hétérogénéité en carbone avec un très fort choc thermique (la pièce est trop massive pour respecter une taille de maille correcte en peau pour la résolution thermique), le calcul numérique permet de valider la possibilité d'un calcul 3D sur pièce réelle.

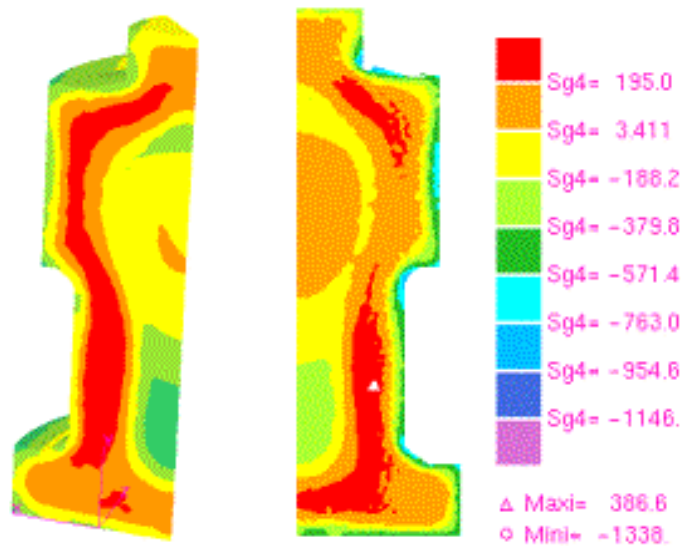


FIG. 7.47 – Contrainte résiduelle ortho-radiale, comparaison des calculs 2D et 3D.

7.5 Conclusion

Ces exemples mettent en évidence un point essentiel: on est capable aujourd'hui de prédire les évolutions des contraintes lors du traitement thermique des aciers. L'intégration du couplage métallurgie-thermique-mécanique permet de tenir compte du chemin complexe que suit le matériau pour aboutir aux contraintes résiduelles. Il est possible d'appliquer le même modèle pour la simulation de pièces massives avec de grandes zones hétérogènes ou pour l'application sur des pièces de petites dimensions dont les zones hétérogènes sont très localisées.

Les simulations numériques qui viennent d'être présentées montrent la faisabilité d'un calcul élément finis en vue d'une application industrielle.

Bibliographie

- [Barralis et al.] Barralis (J.) et Maeder (G.). – *Elaboration, structures, propriétés et normalisation*. – AFNOR NATHAN, *Précis de métallurgie*.
- [Colonna92] Colonna (F.). – *Modélisation numérique du refroidissement des rails*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1992.
- [Denis et al.87] Denis (S.), Sjötröm (S.) et Simon (A.). – Coupled temperature, stress, phase transformation calculation model.numerical illustration of the internal stresses during cooling of a eutectoid carbon steel. *Metall Trans A*, vol. 18A, july 1987, pp. 1203–1212.
- [Denis87] Denis (S.). – *Modélisation des interactions contrainte-transformation de phase et calcul par élément finis de la genèse des contraintes internes au cours de la trempe des aciers*. – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1987.
- [Denis97] Denis (S.). – Prévion des contraintes résiduelles induites par traitement thermique et thermochimique. *La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des matériaux*, février 1997, pp. 157–176.
- [Mey97] Mey (A.). – *Prévion par calcul des cinétiques de transformations de phases et des contraintes internes lors du traitement thermique d'aciers cémentés*. – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, Septembre 1997.
- [Perrin et al.97] Perrin (J.L) et Treuil (J.L). – Optimization of residual stresses in high strength rails at sogerail hayange. *39th Mechanical Working and Steel Processing Conference*, October 1997.

Chapitre 8

Conclusion

Dans cette étude, nous avons développé un modèle qui permet de simuler les évolutions de température, les cinétiques de transformations de phases ainsi que la genèse des contraintes internes au cours de la trempe dans la masse d'une pièce tridimensionnelle présentant un gradient de teneur en carbone.

Pour réaliser ce travail nous avons modifié le code de calcul Forge3© pour tenir compte d'une part de la loi de comportement du matériau, des cinétiques de transformations de phases, d'une thermique spécifique au choc thermique, enfin d'un couplage entre ces trois domaines physiques. Notre travail s'est effectué suivant deux niveaux; premièrement réaliser la structure numérique permettant de traiter le problème thermo-mécanique, et deuxièmement *apporter de la physique aux équations* pour simuler les phénomènes qui s'opèrent lors de la trempe tels les changements de phases.

1. D'un point de vue physique

Notre objectif est de prévoir les contraintes résiduelles ainsi que les distorsions engendrées par le traitement thermique. Nous avons adopté pour atteindre cet objectif un couplage physique afin de rendre compte au mieux du comportement du matériau au cours des changements de phases.

- Nous avons d'abord intégré un modèle de calcul des cinétiques de transformations de phases au cours du refroidissement [Fernandes85]. Ce modèle couplé avec le calcul du champ de température et de contrainte permet de remonter aux contraintes résiduelles d'un matériau homogène en composition [Denis87]. Des exemples simples sur des cas académiques ont montré l'importance du couplage sur les résultats obtenus. La comparaison avec l'expérience sur le refroidissement d'un rail a montré la faisabilité et l'intérêt d'un tel modèle de couplage.
- Puis, nous avons pris en compte l'effet des variations de teneur en carbone [Mey97], et ce dans les différents domaines: thermique, mécanique et métallurgique. Un traitement particulier a été implémenté pour le domaine métallurgique afin de déterminer les cinétiques d'une teneur en carbone donnée à partir des cinétiques de la teneur de référence. De plus dans les domaines thermiques et mécaniques, la dépendance de l'ensemble des données du matériau (propriétés thermophysiques, mécaniques,...) avec la microstructure et la composition chimique a été prise en compte. Le modèle utilisé a permis d'analyser l'effet du

carbone sur les évolutions micro-structurales, et par couplage sur les évolutions des contraintes internes. Nous avons illustré l'intérêt de prendre en compte la composition en carbone sur l'évolution des contraintes dans une dent de pignon cémentée

2. D'un point de vue numérique

Une part importante de notre travail a été de résoudre en 3D l'équilibre d'un corps dont la loi de comportement est thermo-élasto-viscoplastique (THEVP). Ce travail se scinde en deux parties, premièrement la résolution locale de la loi THEVP, puis l'adaptation du modèle éléments finis utilisé à ce type de loi.

- Nous avons utilisé un algorithme de retour radial généralisé pour résoudre les équations de Prandtl-Reuss [Simo et al.85], et intégrer numériquement la loi de comportement. Cet algorithme, déjà éprouvé dans la bibliographie ainsi qu'au laboratoire, permet une résolution numérique satisfaisante. Les comparaisons avec des approches plus performantes comme une intégration de type Runge-Kutta a montré que dans notre domaine de déformation, le retour radial donne les mêmes résultats.
- Nous avons utilisé la formulation MINI-élément du $P1+/P1$ [Coupez97] que nous avons adapté à la loi de comportement THEVP à écrouissage isotrope et cinématique non linéaire. L'adaptation du MINI-élément a permis de minimiser le coût de calcul grâce à une condensation efficace du degré de liberté dit *bulle*. Les convergences éléments finis montrent que la formulation MINI-élément conserve l'ordre de l'élément $P1+/P1$.

La résolution du problème thermique dans le cadre des chocs thermiques, nous a amenés à réfléchir sur des méthodes dites stabilisantes pour *absorber* les forts gradients. Nous avons proposé deux méthodes.

- La première est basée sur une thermique Galerkin standard stabilisée par ce que l'on a appelé la thermique asynchrone. La résolution thermique est désynchronisée du pas de temps réel, cela permet de créer une diffusion artificielle qui stabilise la solution numérique.
- La deuxième méthode repose sur une formulation mixte en température/flux [Pichelin98]. La formulation utilisée est explicite sans gradient et stabilise naturellement les oscillations dues aux chocs. La formulation est efficace même lors de chocs thermiques drastiques mais l'utilisation d'un schéma temporel explicite augmente le temps de calcul.

Nous avons proposé d'utiliser l'une ou l'autre de ces méthodes avec dans certains cas une méthode de continuation entre les deux approches pour bénéficier de leurs atouts respectifs dans tout le domaine de refroidissement.

L'utilisation d'un algorithme de gestion du pas de temps automatique a montré son efficacité en terme de temps de calcul sans diminuer la précision de la résolution. Cette gestion automatique est parfaitement appropriée aux couplages physiques utilisés en adaptant le pas de temps en fonction des changements de phases qui modifient le champ de température.

Les calculs industriels menés ont montré la stabilité et la faisabilité du modèle pour un calcul tridimensionnel. Des comparaisons avec l'expérience bien que qualitatives ainsi que des comparaisons avec le logiciel Quest¹, ont validé nos travaux en thermique, en mécanique, et d'un point de vue métallurgique.

3. Perspectives

Malgré tout, il reste de nombreux points pour lesquels il serait nécessaire d'améliorer le modèle.

- Sur la même démarche il est intéressant d'adapter notre travail au traitement thermique complet incluant chauffage, et revenu. Les modèles existent dans la bibliographie [Mey97], [Aubry98] et pourraient être implémentés pour créer un outil complet pour la simulation numérique des traitements thermiques.
- Afin de réaliser complètement une *filière calcul*, il serait utile de réaliser des ponts entre les opérations de simulation, et de tenir compte de l'influence des variables d'état des étapes précédentes sur le comportement au refroidissement. On pense à la déformation de forgeage par exemple, ou à une ségrégation en élément d'alliage issue de la fonderie [Louin et al.99]. Pour réaliser un tel couplage, l'approche des cinétiques de transformation de phase utilisée dans ce travail sera plus délicate mais toujours possible. Une approche plus locale comme développée par [Saito et al.92] basée sur des principes de germination croissance, où les effets tels que la déformation, ou une variation de la composition en éléments d'alliage seront plus naturels à introduire. On pourrait alors intégrer le modèle dans des logiciels de fonderie comme R2© et THERCAST© qui ne traitent pas le changement de phase solide-solide.
- L'hypothèse d'une homogénéisation avec la loi de mélange est un peu forte. L'utilisation d'une loi micro-macro basée sur les concepts des modèles auto-cohérents [Diani et al.92] apporterait un plus. Il faudra pour cela que la théorie dans ce domaine soit plus avancée pour intégrer un modèle aussi complexe en niveaux de couplages.
- Pour la résolution thermique les méthodes mixtes ont montré leur efficacité pour absorber le choc thermique. Actuellement l'utilisation d'une formulation explicite ne permet pas d'avoir de grand pas de temps et cela est pénalisant pour le temps CPU. Il serait très intéressant d'allier une méthode mixte à un schéma implicite afin d'avoir à la fois une résolution stable vis à vis des chocs thermiques et rapide pour diminuer les temps de la simulation.
- Enfin il serait intéressant d'étudier le couplage fluide-structure (fluide de refroidissement) afin de mieux comprendre les conditions aux limites thermiques.

1. Quest est le logiciel du LSG2M Mines de Nancy.

Jusqu'à présent les conditions aux limites sont *fittées* de manière à reproduire l'évolution thermique expérimentale. Ce couplage pouvant être de divers niveaux: dans un premier temps on pourrait s'inspirer des approches simplifiées basées sur les théories des nombres de Reynolds et Nusselt [Hanz et al.99], [Bergmann et al.99] pour déterminer les tendances des variations des coefficients de transferts en fonction des conditions de refroidissement (fluide, forme de la pièce....). Dans un deuxième temps un calcul numérique élément finis du fluide aiderait à la détermination des conditions limites [Baker et al.99].

Bibliographie

- [Aubry98] Aubry (C.). – *Modélisation et étude expérimentale des cinétiques de revenu/autorevenu d'aciers trempés. Prévission des contraintes résiduelles de trempe dans un acier cémenté en incluant l'autorevenu.* – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1998.
- [Baker et al.99] Baker (A.J.) et Winowich (N.S.). – Issues critical cfd simulation of heat treating and quenching processes. *Proceeding of the 3rd international conference on quenching and control of distortion, Prague, Czech Republic.*, March 1999.
- [Bergmann et al.99] Bergmann (D.), Heck (U.) et Bauckhage (K.). – Heat transfert cooling characteristics of individual parts gas quenching. *Proceeding of the 3rd international conference on quenching and control of distortion, Prague, Czech Republic.*, March 1999.
- [Coupez97] Coupez (T.). – Stable stabilized finite element for 3d forming calculation. – 1997. à paraître.
- [Denis87] Denis (S.). – *Modélisation des interactions contrainte-transformation de phase et calcul par élément finis de la genèse des contraintes internes au cours de la trempe des aciers.* – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1987.
- [Diani et al.92] Diani (J.M.), Sabar (H.) et Berveiller (M.). – Micromechanical modelling of the transformation induced plasticity (trip) phenomenon in steels. *Int. J. Eng. Sci.*, vol. 33, n° 13, 1992, pp. 1921–1934.
- [Fernandes85] Fernandes (F.M.). – *Modélisation et calcul de l'évolution de la température et de la microstructure au cours du refroidissement des aciers.* – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1985.
- [Hanz et al.99] Hanz (M.) et George (E.). – Water spray and water film cooling. *Proceeding of the 3rd international conference on quenching and control of distortion, Prague, Czech Republic.*, March 1999.
- [Louin et al.99] Louin (J-C.), S.Denis, G.Lesoult, H.Combeau, A.Simon, C.Aliaga et E.Massoni. – Effect of solidification segregations on phase transformation kinetics and on the development of internal stresses during coolings of steels. *Actes 5th European Conference on Residual Stresses ECRS5, edit A.J.Böttger, R. Delhez, E.J. MittemeijerDelft-Noordwilerout, Pays-Bas*, Septembre 1999. – à paraître.
- [Mey97] Mey (A.). – *Prévission par calcul des cinétiques de transformations de phases et des contraintes internes lors du traitement thermique*

- d'aciers cimentés*. – Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Lorraine, Septembre 1997.
- [Pichelin98] Pichelin (E.). – *Calcul par éléments finis du remplissage 3D pour fluides visqueux incompressibles. Application à l'injection*. – Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris, 1998.
- [Saito et al.92] Saito (Y.) et Shiga (C.). – Computer simulation of microstructural evolution in thermo-mechanical processing of steels plates. *ISIJ Int.*, vol. 32, n° 3, 414–422 1992.
- [Simo et al.85] Simo (J.C) et Taylor (R.L.). – Consistent tangent operators for rate independent elastoplasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 48, 1985, pp. 101–118.

Résumé:

Ce travail porte sur le développement d'un outil de simulation numérique du traitement thermique des aciers. La simulation numérique d'un procédé aussi complexe nécessite la compréhension de la thermique, de la mécanique et de la métallurgie ainsi que de leurs interactions pendant tout le refroidissement. Cette étude se trouve au carrefour de plusieurs disciplines comme le numérique, la mécanique et la métallurgie. Dans le but de réaliser une étude complète, cette étude fait suite à de précédents travaux dans chacune des disciplines nommées, et a pour but de faire converger les connaissances dans ces domaines pour réaliser l'ensemble des couplages nécessaires pour une représentation réaliste du procédé. C'est tout naturellement que ce travail se décompose principalement en trois parties:

Premièrement les méthodes numériques employées pour la résolution du problème thermomécanique sont décrites. Le modèle thermomécanique repose sur une loi de comportement thermo-élasto-viscoplastique additive à écrouissage isotrope et cinématique. Le modèle éléments finis est basé sur un traitement original de l'élément P1+/P1 dans le but de réduire le temps de calcul tout en conservant l'ordre d'interpolation de l'élément. Le couplage thermomécanique est un couplage alterné par incrément de type Gauss-Seidel. Ce couplage est géré par une gestion automatique du pas de temps pour assurer la convergence globale du système.

Dans une deuxième étape, nous avons intégré un modèle de calcul des évolutions des cinétiques de transformation de phases au cours du refroidissement de pièces présentant un gradient de teneur en carbone.

Finalement, nous avons développé les couplages métallurgie-thermomécanique, et l'ensemble de ces interactions est validé sur des géométries cylindriques. Enfin, au dernier chapitre nous présentons la confrontation modèle-expérience sur deux types d'application. Premièrement dans le cas de refroidissement naturel d'un coupon de rail, et deuxièmement sur la trempe d'un pignon automobile cémenté.

La stratégie du modèle couplé permet d'envisager des simulations pour des cas industriels de la phase de refroidissement et de trempe du procédé de traitement thermique.

Mots-clés: traitement thermique, simulation numérique 3D, éléments finis, thermomécanique, cinétiques de transformations, couplages.

Abstract:

This work presents a general solution for the 3D heat treating for steels. The cooling or quenching of steel workpieces involves thermal, microstructural and mechanical phenomena. In order to predict residual stresses and to limit distortions, it is necessary to take into account strong coupling of this three phenomena. This dissertation describes a coupled finite element formulation for to computing stress, strain, and temperature fields as well as microstructure evolutions during cooling.

We first present the thermo-mechanical resolution. The thermal elastic visco-plastic THEVP constitutive equation is chosen to cover a large domain of deformation, from purely viscoplastic at high temperature to elastic-plastic at the end of the heat treatment process, with non linear kinematic/isotropic hardening laws. A 3D mixed finite element (velocity/pressure) is used with the same interpolation for mechanical and thermal discretisation. This formulation is based on an original treatment of the P1+/P1 finite element formulation for linear and non linear cases, in order to satisfy compatibility conditions.

We introduce a modelling scheme for transformation kinetics. A metallurgical model is set up in order to determine phase volume fractions during cooling. The model includes temperature rate, the stress state and the carbon heterogeneity as variables.

Finally, we take into account the coupling between phase transformations and thermo-mechanical behavior. The coupled problem is solved by iterating on the three fields: thermal, metallurgical and mechanical ones. The efficiency of this general framework is illustrated through examples of academic cases and 3 dimensional industrial applications.

Key-words: heat treatment, 3D numerical simulation, finite element, thermomechanical analysis, transformation kinetics, coupling.